

Bemerkungen zum inversen Problem der optischen Spektroskopie inhomogener Materie

Keßler, Franz Rudolf

Veröffentlicht in:
Abhandlungen der Braunschweigischen
Wissenschaftlichen Gesellschaft Band 46, 1995,
S.29-63



Verlag Erich Goltze KG, Göttingen

Bemerkungen zum inversen Problem der optischen Spektroskopie inhomogener Materie

Von **Franz Rudolf Keßler***, Braunschweig

(Eingegangen am 25.10.95)

Kurzfassung:

Die optische Spektroskopie spielt im Rahmen der Bestimmung von Materialeigenschaften insofern eine bedeutende Rolle, als das Licht, und zwar unter Einschluß der nicht sichtbaren Spektralbereiche des UV und IR, eine Sonde darstellt, die nicht zerstörend, „berührungslos“ und sowohl aus größerer Distanz als auch im Vakuum eingesetzt werden kann. Die Materialanalyse basiert dabei auf der Vermessung des Reflexions- und Transmissionsvermögens der Strahlung in ihren spektralen Abhängigkeiten als Funktion des Einfallswinkels und des Polarisationszustandes des Lichtes. Da bei optisch inhomogener Materie das Reflexions- und das Transmissionsvermögen von dem räumlichen Verlauf der Brechzahl „ n “ und der Absorptionszahl „ k “, im Innern der Probe abhängen, erhebt sich das „inverse Problem“. Das ist das Problem des eindeutigen Rückschlusses aus der integralen optischen Messung außerhalb der Probe auf das im konkreten Fall innerhalb der Materialprobe vorliegende Profil der komplexen Brechungszahl $\tilde{n} = (n - i \cdot k)$ bzw. der mikrophysikalischen Dispersionsparameter.

Die vorliegende Arbeit diskutiert spezielle Aspekte dieses Umkehrungsproblems. Das dabei konkret ins Auge gefaßte Material entspricht dem inhomogenen Halbleiter, dessen komplexe Brechungszahl z.B. mit der räumlich inhomogenen Konzentration freier Ladungsträger variiert. Die optische Inhomogenität kann auch, alleine oder zusätzlich, durch strukturelle Modifikationen, d.h. durch innere Spannungen, Amorphisierung bei der Ionenimplantation, einen Aufbau aus verschiedenen Materialien (vergl. z.B. die Supergitter und die MIS-Strukturen) etc., bedingt sein.

Diskussionspunkte des inversen Problems sind hier die Fragen der mathematischen Behandlung der optischen Inhomogenität mittels des Matrizenkalküls und der Anpassung der Inhomogenitätsparameter an die experimentell ermittelten Spektralstrukturen als Optimierungsaufgabe. Ein wesentliches Spezifikum der Problemstellung ist dadurch gegeben, daß die Möglichkeit der Reproduktion der gegebenen Spektren bei einem gegebenen bzw. physikalisch sinnvollen Dispersionsmechanismus vorhanden sein muß. Als Dispersionsmechanismen kommen alle bekannten mikrophysikalischen Responsemodelle in Betracht. Speziell für die Halbleiter mit freien Ladungsträgern und im Spektralbereich auf der langwelligen Seite der Absorptionskante wird hier dazu die Drude-Theorie in ihrer quantenmechanischen Erweiterung zur Erfassung des dispersiven und absorptiven Einflusses der freien Ladungsträger betrachtet.

* Univ. Professor Dr. Franz Rudolf Keßler · Inst. f. Halbleiterphysik und Optik der
TU Braunschweig · 38023 Braunschweig

I Einleitung

Die optische Spektroskopie spielt im Rahmen der Bestimmung von Materialeigenschaften insofern eine bedeutende Rolle, als das Licht, und zwar unter Einschluß der nicht sichtbaren Spektralbereiche des UV und des IR, eine Sonde darstellt, die nicht zerstörend, „berührungslos“ und sowohl aus größerer Distanz als auch im Vakuum eingesetzt werden kann. Die Materialanalyse basiert primär auf der Vermessung des Reflexions- und Transmissionsvermögens der Strahlung in ihren spektralen Abhängigkeiten als Funktion des Einfallswinkels und des Polarisationszustandes des Lichtes. Da bei optisch inhomogener Materie das Reflexions- und das Transmissionsvermögen von dem räumlichen Verlauf der sogen. optischen Konstanten des Materials, das sind die in der komplexen Brechungszahl zusammengefaßten Werte der Brechzahl und der Absorptionzahl, im Innern der Probe abhängen, erhebt sich bezüglich der Inhomogenitätsanalyse das „Inversenproblem“.*) Das ist das Problem des eindeutigen Rückschlusses aus der integralen optischen Messung außerhalb der Probe auf das im konkreten Fall innerhalb der Materialprobe vorliegende Profil der komplexen Brechungszahl bzw. der mikrophysikalischen Dispersionsparameter. Das Problem besteht also darin, zu ermitteln, ob und wenn ja, auf welche Weise das Inverse bzw. die Inversen zu den gegebenen Spektralwerten der optischen Reflexion und Transmission bestimmt und damit die gewünschten Informationen über die relevanten inneren Inhomogenitäten der Materie gewonnen werden können.

Insofern ist die Fragestellung zu denjenigen Problemen der Physik analog, bei denen integrale Größen gemessen werden bzw. bekannt sind, der differentielle Verlauf des Integranden jedoch bestimmt werden soll. Dieses inverse Problem ist theoretisch und bezogen auf konkrete Meßgrößen vielfältig behandelt worden. Da das inverse Problem das „klassische“ Problem der Geophysik bzw. der geophysikalischen Prospektion ist, nämlich aus seismischen, gravimetrischen oder elektrisch-magnetischen Messungen im Außenraum auf den erdinneren Verlauf der Gesteins- und Wasserstrukturen zu schließen, sei hier auch auf die sehr informative Kollektion von relevanten Veröffentlichungen aus den letzten 35 Jahren verwiesen [1a] und auf die Proceedings eines 1993 stattgefundenen Kongresses zu diesem Themenkreis [1b].

Anläßlich des 100. Todestages von Hermann von Helmholtz fand 1994 in Berlin eigens ein Symposium zum inversen Problem statt [2], denn Hermann von Helmholtz hatte bereits 1853 in einer frühen Arbeit das Problem des Rückschlusses auf die Stromverteilung in einem Leiter aufgrund der äußeren Messung des durch den Strom verursachten elektromagnetischen Feldes behandelt [3].

Zahlreich ist auch die mathematische bzw. numerisch-mathematische Literatur, in der die Lösung des Inversenproblems in systematischer Weise auf verschiedene Typen

*) Die Lösung einer Differentialgleichung (DGL) mit variablem Koeffizienten wird als „direktes Problem“ bezeichnet. Demgegenüber charakterisiert man die Bestimmung der Funktion des variablen Koeffizienten anhand einer (oder mehrerer) Integralbeziehungen, bei der die Lösung der DGL im Integranden enthalten ist, als das „inverse Problem“ [engl.: „inverse problem“]. – Insofern tritt auch in der vorliegenden Arbeit der Ausdruck „inverses Problem“ als Terminus technicus auf.

von Integralgleichungen zurückgeführt wird (vergl. dazu z.B. [4, 5]). Es ist jedoch zu beachten, daß im vorliegenden Fall des optischen Responses weder ein linearer Funktionszusammenhang besteht, noch eine Zerlegung des Integranden in zwei Faktoren, d.h. in eine Funktion der Variablen Ort und Wellenlänge (Kernel) und eine reine Ortsfunktion, möglich ist. Die Realisierung der Inversion ist hier demnach weder mit Hilfe der Matrizenrechnung, noch mit den Verfahren zur Auflösung der Fredholm-Integrale möglich. Es bleibt nur die Lösung als „Optimierungsaufgabe“.

Eine gewisse Verwandtschaft des hier behandelten optischen Inversenproblems besteht zu dem bekannten Verfahren der Tomographie zur bildgebenden Inhomogenitätsbestimmung unter Verwendung von Röntgenstrahlen. Dort wird jedoch ausschließlich eine Analyse der ortsabhängigen Absorption der Probe durchgeführt. Dabei wird die Durchstrahlungsrichtung der Probe systematisch variiert, während i. allg. die Wellenlänge konstant bleibt. Bei jeder Durchstrahlungsrichtung wird außerdem die transmittierte Intensität quer zur Durchstrahlungsrichtung orts aufgelöst detektiert. Aus Theorie und Praxis ist bekannt [6], daß auf diese Weise eine eindeutige Bestimmung des räumlichen Verlaufs der Absorption möglich ist.

Im vorliegenden Fall liegt die optische Strahlung jedoch in einem Bündel vor, das die ganze Probe unter festgehaltenen geometrischen Bedingungen durchsetzt. Zunächst wird sogar zur Vereinfachung geometrischer Verhältnisse näherungsweise senkrechte Inzidenz auf die Oberfläche einer planparallelen Probe und ein Inhomogenitätsgradient ausschließlich in Strahlrichtung vorausgesetzt. Es wird im Außenraum stets die gesamte von der Probe reflektierte bzw. transmittierte Strahlung detektiert, dies jedoch in ihrer spektralen Abhängigkeit. Durch Umwendung der Probe wird die resultierende reflektierte Intensität auch bei Umkehr der Durchstrahlungsrichtung der Probe gemessen. Entgegen der i. allg. unterschiedlichen resultierenden Reflexionsgrade bei der Richtungsumkehr hängt dabei jedoch die resultierende transmittierte Intensität nicht von der Lichtausbreitungsrichtung in der Probe ab, wenn die beiden Begrenzungsmedien absorptionsfrei sind („Reziprozitätsgesetz“). Diese Transmissionssymmetrie läßt sich theoretisch begründen und findet sich auch in der Praxis bestätigt. Die praktisch-experimentelle Bestätigung setzt allerdings voraus, daß die Meßanordnung selbst in Reflexion und Transmission symmetrisch und einwandfrei justiert ist, – eine nicht immer leicht zu erfüllende „conditio sine qua non“.

Im Fall der optischen Spektroskopie hängt die Meßgröße andererseits nicht nur von der ortsabhängigen Absorptionszahl „ k “, sondern auch von dem inhomogenen Verlauf der Brechzahl „ n “ des Mediums ab. Ziel der Inversion ist es deshalb, das Tiefenprofil beider Größen bzw. das der komplexen Brechzahl $\tilde{n} = (n - i \cdot k)$ zu bestimmen, in der die beiden reellen Größen n und k üblicherweise zusammengefaßt werden. In diesem Sinne sind zunächst mikrophysikalisch gesehen Brechzahl und Absorptionszahl voneinander unabhängige Materialkonstanten. Unter gewissen, allerdings meistens erfüllten Bedingungen, stehen sie jedoch im Zusammenhang der sogen. Kramers-Kronig-Relation („KKR“) [7, 8]. Die Anwendung der integralen KKR setzt allerdings in jedem Fall die Kenntnis einer der „optischen Konstanten“ n bzw. k in einem relativ ausgedehnten Spektralbereich voraus. – Diese spektrale (!) Interdependenz von n und k über die KKR wird hier im Rahmen der primären Suche nach Ortsabhängigkeiten nicht weiter ausgenutzt.

Die wesentliche Information über den Inhomogenitätsverlauf der Brechzahl n und (!) der Absorptionszahl k wird also im folgenden aus drei Spektren, d.h. aus der spektralen Abhängigkeit der beiden gemessenen resultierenden Reflexionsgrade und des resultierenden Transmissionsgrades der gesamten Probe gewonnen. Es erscheint einsichtig, daß es in jedem Fall zweckdienlich ist, zur Sicherung der Inhomogenitätsanalyse sowohl einen möglichst breiten Spektralbereich zu verwenden als andererseits durch die Wahl einer entsprechenden Probendicke und/oder Wellenlänge der Strahlung sicherzustellen, daß hinreichend ausgedehnte Spektralbereiche mit meßbarer Transmission überhaupt existieren.

Die vorliegende Arbeit diskutiert spezielle Aspekte dieses inversen Problems der optischen Spektroskopie. Das dabei konkret ins Auge gefaßte Material ist der inhomogene Halbleiter, dessen komplexe Brechungszahl primär mit der räumlich inhomogenen Konzentration freier Ladungsträger variiert. Die optische Inhomogenität kann aber auch, oder zusätzlich, durch strukturelle Modifikationen, d.h. durch innere Spannungen, Amorphisierung bei der Ionenimplantation, einen Aufbau aus verschiedenen Materialien (vergl. z.B. die Supergitter und die MIS-Strukturen) etc., bedingt sein.

Die mathematische bzw. mathematisch-numerische Modellierung des Problems kann prinzipiell auf zweifache Weise erfolgen:

- 1.) Modellierung des inhomogenen Verlaufs der komplexen Phasengeschwindigkeit der Strahlung bei gegebener Wellenlänge und Lösung der Wellengleichung für die Ausbreitung der elektromagnetischen Welle innerhalb der inhomogenen Struktur einschließlich der Berücksichtigung der Randbedingungen [9, 10] und
- 2.) Anwendung des Matrizenkalküls auf eine Stapelfolge von parallelen, jeweils in sich homogenen Schichten, mit deren Hilfe die inhomogene Struktur approximiert werden kann. Das ist das aus der Theorie der Wellenleiter bekannte Verfahren der Vierpoltheorie [11], dessen Tragfähigkeit nach „optischer Anpassung“ hinreichend erwiesen ist [12, 13, 14]. Das Matrizenverfahren kennt dabei zwei Varianten: ausgehend vom Ansatz einerseits der elektrischen und magnetischen Teilwelle der elektromagnetischen Strahlung („EH-Ansatz“) und andererseits einer hin- und einer rücklaufenden elektrischen Teilwelle („E⁺E⁻-Ansatz“).

Beide Verfahren, d.h. die Lösung der Wellengleichung oder die Verwendung der Matrizenrechnung in Verbindung mit der Schichteinteilung der Probe, sind äquivalent. Die Matrizenrechnung erlaubt jedoch einfachere Aufspaltungen in Teilprobleme und ist deshalb u.U. „anschaulicher“. Die vorliegenden Ausführungen beschränken die Diskussion deshalb auf das „Matrizenverfahren“ und bevorzugen dabei den EH-Ansatz.

Die Frage der Eindeutigkeit der Lösung des inversen Problems im vorliegenden Fall wird in dreierlei Hinsicht behandelt:

- 1.) Da die sogen. „resultierende Matrix“, die eine inhomogene Probe eindeutig repräsentiert, d.h. bei gegebener Wellenlänge und gegebenen Abschlußmedien bereits die resultierenden Spektralwerte der beiden Reflexionsgrade (vorwärts und rückwärts) und den Transmissionsgrad liefert, stellt sich die Frage nach der Möglichkeit einer Äquivalenzdarstellung der resultierenden Matrix durch ein Medium mit anderem In-

homogenitätsaufbau. Dies ist die Frage nach der Eindeutigkeit der Zuordnung zwischen Reflexion und Transmission bzw. einer resultierenden Matrix einerseits und dem Inhomogenitätsprofil andererseits bei nur einer isolierten Vakuumwellenlänge des Lichtes.

- 2.) Es wird die Frage aufgeworfen nach der Möglichkeit einer Anpassung der Inhomogenitätsparameter zur Gewinnung eines komplexen Brechzahlprofils zur Reproduktion der gegebenen Spektren allein durch Lösung der zugeordneten mathematischen „Optimierungsaufgabe“. Dies wäre eine rein phänomenologische Inhomogenitätsbestimmung.
- 3.) Schließlich erfolgt die Diskussion der Eindeutigkeit der Lösung des inversen Problems auf der Basis eines gegebenen mikrophysikalischen Dispersionsmodells.

Die dritte Frage ist die Frage nach der physikalischen Realität. Wenn z.B. die Fragen 1.) und/oder 2.) zu einer eindeutigen, in diesem Fall aber zunächst rein hypothetischen Lösung führen, bleibt nämlich noch die Frage offen, ob mit einem realen physikalischen Dispersionsmechanismus im Rahmen konkreter Möglichkeiten der Variation der mikrophysikalischen Parameter das gefundene Schichtsystem bzw. Profil des komplexen Brechungsindex überhaupt erreicht werden kann. – Der Vorgabe entsprechend, werden diesbezüglich hier Halbleiter mit freien Ladungsträgern betrachtet, wobei als Dispersionsmodell die quantenmechanisch adaptierte Drude-Theorie für den optischen Einfluß der freien Ladungsträger bei ortsabhängigem Konzentrationsverlauf in Halbleitern betrachtet wird.

II Äquivalenzdarstellung der resultierenden Matrix

1.) Grundsätzliches

Eine planparallele Platte optisch inhomogener Materie kann, wie an anderer Stelle bereits diskutiert wurde [11 bis 16], mit Hilfe der Matrizenrechnung mathematisch so behandelt werden, daß der resultierende Reflexionsgrad $R_{\text{res}}(A \rightarrow B)$ bei Lichteinfall aus dem Eingangsmedium „A“ und der dabei auftretende Transmissionsgrad $T_{\text{res}}(A \rightarrow B)$ berechnet werden kann. Das Eingangsmedium „A“ und das Abschlußmedium „B“ sind beide als „rückwirkungsfrei“ vorausgesetzt, was z.B. einer unendlichen Ausdehnung entspricht. Gleichmaßen sollen Lichtquelle und -detektor als rückwirkungs- und reflexionsfrei vorausgesetzt sein. Ebenso wird der resultierende Reflexions- und Transmissionsgrad $R_{\text{res}}(B \rightarrow A)$ bzw. $T_{\text{res}}(B \rightarrow A)$ bei der Umkehrung der Lichtausbreitungsrichtung, d.h. bei dem Lichteinfall aus dem Medium „B“, auf diese Weise berechnet. Sind die beiden Begrenzungsmedien A und B absorptionsfrei, so ergibt sich unmittelbar aus der Matrizenrechnung, daß der auf die Lichtintensität bezogene resultierende Transmissionsgrad T_{res} für beide Lichtausbreitungsrichtungen gleich groß ist, d.h. es gilt $T_{\text{res}}(A \rightarrow B) = T_{\text{res}}(B \rightarrow A)$. Mit Hilfe der Matrizenrechnung ist auf diese Weise einer der möglichen Beweise für das Reziprozitätsgesetz geführt worden [13a)].

Zur Vereinfachung der Darstellung wird hier senkrechte Inzidenz auf die Planplatte bzw. auf ein Schichtsystem aus planparallelen Einzelschichten vorausgesetzt. Das bedeutet keine Einschränkung der Allgemeinheit, führt jedoch zu einer nicht unerheblichen

Vereinfachung des Formelapparates und eliminiert die Unterscheidung des Polarisationszustandes des Lichtes.

Die Matrizenmethodik kann sowohl den Fall der kohärenten als auch den Fall der inkohärenten Vielfachreflexion in der Planplatte und jedwede Kombination von kohärenter und inkohärenter Vielfachreflexion innerhalb eines beliebigen Schichtsystems behandeln.

Die Berücksichtigung der inkohärenten Vielfachreflexion mit Hilfe der Matrizenmethode basiert auf der Bilanzierung der Energieflußdichte der elektromagnetischen Wellen [15] und geht vom Ansatz einer hin- und einer rücklaufenden Flußdichte aus. Interferenzen treten dabei nach Voraussetzung nicht auf.

Bei der Behandlung der kohärenten Vielfachreflexion mit den interferierenden Teilstrahlen existieren zwei unterschiedliche Matrizenverfahren:

- a) „ E^+E^- -Ansatz“: Basis ist eine hin- und eine rücklaufende Teilwelle der elektrischen Feldstärke unter Berücksichtigung der Fresnelschen Faktoren für die Reflexion und Transmission der elektrischen Feldstärke in der jeweiligen Ausbreitungsrichtung an den Grenzflächen mittels der jeweiligen „Grenzflächenmatrix“ und den beim Volumendurchgang auftretenden Phasen- und Amplitudenänderungen mittels der jeweiligen „Volumen-Matrix“ [15].
- b) „EH-Ansatz“: Basis ist die Betrachtung der elektrischen und der magnetischen Teilwelle der elektromagnetischen Strahlung unter Berücksichtigung der Stetigkeitsbedingungen für die elektrische bzw. magnetische Feldstärke an jeder Grenzfläche, der beim Volumendurchgang auftretenden Phasen- und Amplitudenänderung sowie des durch den Wellenwiderstand gegebenen Zusammenhangs zwischen der elektrischen und der magnetischen Feldstärke [16].

Bei beiden Matrizenverfahren werden die Einzelmatrizen unter Beachtung der Reihenfolge zu der resultierenden Matrix multipliziert. Bei insgesamt j Schichten sind es im Fall

- a) $(2 \times j) + 1$ Einzelmatrizen und im Fall
- b) $j + 1$ Einzelmatrizen,

die miteinander zu multiplizieren sind. Da in beiden Fällen die Determinante jeder Einzelmatrix gleich Eins ist, ist auch in beiden Fällen die Determinante der resultierenden Matrix gleich Eins.

Das meßtechnisch relevante Resultat wird in beiden Fällen unterschiedlich gewonnen:

- a) Die resultierende Matrix bei dem E^+E^- -Ansatz enthält für die elektrische Feldstärke die komplexen resultierenden Reflexions- und Transmissionsfaktoren. Der jeweilige resultierende Reflexionsgrad R_{res} ist dann das Betragsquadrat des zugehörigen komplexen resultierenden Reflexionsfaktors. Der resultierende Transmissionsgrad T_{res} ist das Betragsquadrat des jeweiligen komplexen resultierenden Transmissionsfaktors \tilde{t}_{res} multipliziert mit dem Quotienten $\text{Re}\{1/\tilde{Z}(B)\}/\text{Re}\{1/\tilde{Z}(A)\}$, wenn das Licht vom Begrenzungsmedium „A“ zum Abschlußmedium „B“ fortschreitet bzw.

$\text{Re}\{1/\tilde{Z}(A)\}/\text{Re}\{1/\tilde{Z}(B)\}$ bei Richtungskehr [\tilde{Z} = komplexer Wellenwiderstand des Mediums].

Sind die beiden Abschlußmedien „amagnetisch“, d.h. wenn gilt:

$$\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A) = \tilde{\mu}_{\text{rel}}(B) = 1,$$

so tritt aufgrund der dann in der Form $\tilde{n} = \sqrt{\tilde{\epsilon}_{\text{rel}}}$ gültigen Maxwell'schen Relation der Quotient $\text{Re}\{\tilde{n}(B)\}/\text{Re}\{\tilde{n}(A)\}$ an die Stelle des Quotienten $\text{Re}\{1/\tilde{Z}(B)\}/\text{Re}\{1/\tilde{Z}(A)\}$ bzw. entsprechend bei Richtungskehr.

Für den resultierenden Transmissionsgrad $T_{\text{res}}(A \rightarrow B)$ gilt also:

$$T_{\text{res}}(A \rightarrow B) = \left| \tilde{\tau}_{\text{res}}(A \rightarrow B) \right|^2 * \frac{\text{Re}\{1/\tilde{Z}(B)\}}{\text{Re}\{1/\tilde{Z}(A)\}}$$

bzw. für $\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A) = \tilde{\mu}_{\text{rel}}(B) = 1$ (1)

$$T_{\text{res}}(A \rightarrow B) = \left| \tilde{\tau}_{\text{res}}(A \rightarrow B) \right|^2 * \frac{\text{Re}\{\tilde{n}(B)\}}{\text{Re}\{\tilde{n}(A)\}}$$

$T_{\text{res}}(B \rightarrow A)$ ergibt sich entsprechend durch Vertauschung von „A“ und „B“.

b) Die resultierende Matrix mit ihren komplexen Koeffizienten beim EH-Ansatz sei $||MX||$ genannt:

$$||MX|| \equiv \begin{vmatrix} mx11 & mx12 \\ mx21 & mx22 \end{vmatrix} \quad (2)$$

$$\text{mit } \text{DET}(|MX|) = mx11 * mx22 - mx12 * mx21 = 1$$

Sie gestattet zunächst die Berechnung des resultierenden komplexen Eingangswiderstandes $\tilde{W}(A \rightarrow B, \tilde{Z}(B))$ bzw. bei Umkehr der Lichtausbreitungsrichtung $\tilde{W}(B \rightarrow A, \tilde{Z}(A))$ in Abhängigkeit von dem komplexen Wellenwiderstand \tilde{Z} des jeweiligen Abschlußmediums nach der Beziehung:

$$\tilde{W}\{A \rightarrow B, \tilde{Z}(B)\} = \frac{mx11 * \tilde{Z}(B) + mx12}{mx21 * \tilde{Z}(B) + mx22} \quad (3)$$

Der komplexe resultierende Reflexionsfaktor $\tilde{r}_{\text{res}}(A \rightarrow B)$ bzw. $\tilde{r}_{\text{res}}(B \rightarrow A)$ berechnet sich dann nach der Beziehung

$$\tilde{r}_{\text{res}}(A \rightarrow B) = \frac{\tilde{Z}(A) - \tilde{W}\{A \rightarrow B, \tilde{Z}(B)\}}{\tilde{Z}(A) + \tilde{W}\{A \rightarrow B, \tilde{Z}(B)\}} \quad (4)$$

und der komplexe resultierende Transmissionsfaktor $\tilde{t}_{\text{res}}(A \rightarrow B)$ bzw. $\tilde{t}_{\text{res}}(B \rightarrow A)$ nach

$$\tilde{t}_{\text{res}}(A \rightarrow B) = \frac{2 * \tilde{Z}(B)}{mx22 * \tilde{Z}(A) + mx12 + mx21 * \tilde{Z}(A) * \tilde{Z}(B) + mx11 * \tilde{Z}(B)} \quad (5)$$

Zu den auf die Strahlungsflußdichte bezogenen Größen resultierender Reflexionsgrad R_{res} und resultierender Transmissionsgrad T_{res} kommt man weiter wie unter Fall a).

Natürlich sind die nach beiden Methoden berechneten Ergebnisse exakt gleich. Der Vorteil der Methode b), der im übrigen die Vorgehensweise der Vierpoltheorie bei der Behandlung elektrischer Leitungen entspricht [11], ist jedoch in dem Umstand begründet, daß die resultierende Matrix alleiniger Repräsentant der homogenen (oder inhomogenen) Schicht bzw. des Schichtsystems ist, denn sie enthält die komplexen Materialgrößen der Begrenzungsmedien nicht. Dadurch wird eine getrennte Diskussion der optischen Eigenschaften von Schicht bzw. Schichtsystem und des optischen Einflusses der angrenzenden Medien, die im Experiment z.B. gezielt gewechselt werden können, erleichtert. – Aus diesem Grunde wird im folgenden die EH-Methode bevorzugt.

Die „resultierende Matrix“ $||MX||$ als Produkt von Matrizen im EH-Ansatz, die je eine homogene Schicht in ihrem optischen Verhalten repräsentieren, hat (vergl. oben) notwendigerweise eine Determinante gleich eins und ist damit „übertragungssymmetrisch“ [9, Seite 115]. Daraus folgt u.a., daß sie in beiden Lichtausbreitungsrichtungen das gleiche komplexe „Betriebsübertragungsmaß“ \tilde{g}_Z besitzt, um mit dem Vokabular der Vierpoltheorie für elektrischen Leitungen zu sprechen. Die Koeffizienten der resultierenden Matrix enthalten damit in der Hauptdiagonale den Faktor $\cosh(\tilde{g}_Z)$ und in der Nebendiagonale den Faktor $\sinh(\tilde{g}_Z)$. Optisch bedeutet genau dies die Erfüllung des „Reziprozitätsgesetzes“ bei beiderseits nichtabsorbierenden Abschlußmedien.

Die resultierende Matrix $||MX||$ [vergl. (1)] ist aber i. allg. „widerstandsunsymmetrisch“, denn die beiden Elemente der Hauptdiagonale sind ungleich: $m_{x11} \neq m_{x22}$. Damit sind auch die beiden Wellenwiderstände \tilde{Z}_1 und \tilde{Z}_2 des Vierpols ungleich, denn sie sind gegeben durch die beiden Beziehungen:

$$\begin{aligned}\tilde{Z}_1 &= (m_{x11} m_{x12}) / (m_{x21} m_{x22}) \\ \tilde{Z}_2 &= (m_{x22} m_{x12}) / (m_{x21} m_{x11}).\end{aligned}\quad (6)$$

Ausgedrückt mit dem Betriebsübertragungsmaß und diesen beiden Wellenwiderständen hat die resultierende Matrix die Form:

$$||MX|| = \begin{vmatrix} \sqrt{\tilde{Z}_1/\tilde{Z}_2} \cosh(\tilde{g}_Z) & \sqrt{\tilde{Z}_1 * \tilde{Z}_2} \sinh(\tilde{g}_Z) \\ \sqrt{1/(\tilde{Z}_1 * \tilde{Z}_2)} \sinh(\tilde{g}_Z) & \sqrt{\tilde{Z}_2/\tilde{Z}_1} \cosh(\tilde{g}_Z) \end{vmatrix} \quad (7)$$

Die resultierende Matrix ist also i. allg. durch drei voneinander unabhängige komplexe Größen bzw. sechs voneinander unabhängige reelle Größen bestimmt.

Die Matrix einer einzelnen homogenen Schicht „q“ ist sowohl übertragungssymmetrisch als auch widerstandssymmetrisch, denn sie ist gekennzeichnet durch das

$$\text{Betriebsübertragungsmaß } \tilde{g}_{Z\text{hom}}(q) = i * 2 * \pi * \tilde{n}(q) * d(q) / \lambda \quad (8)$$

$$\text{mit } \tilde{n}(q) = \sqrt{\tilde{\mu}_{\text{rel}}(q) * \tilde{\epsilon}_{\text{rel}}(q)}$$

$$d(q) = \text{Schichtdicke}$$

$$\lambda = \text{Licht-Vakuumwellenlänge}$$

und den

$$\text{Wellenwiderstand } \tilde{Z}(q) = Z_0 * \sqrt{\tilde{\mu}_{\text{rel}}(q) / \tilde{\epsilon}_{\text{rel}}(q)} \quad (9)$$

des Materials (in unendlich großer Ausdehnung!). Dabei sind:

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_{\text{rel}}(q) &= \text{relative komplexe Permeabilität,} \\ \tilde{\epsilon}_{\text{rel}}(q) &= \text{relative komplexe Dielektrizitätskonstante} \\ Z_0 &= \text{Wellenwiderstand des Vakuums} \\ &= 4 * \pi * c \text{ [Ohm} * \text{s/m]} \\ c &= \text{Vakuumlichtgeschwindigkeit.} \end{aligned}$$

Die Matrix der homogenen Einzelschicht hat danach die Form:

$$||Mq|| = \left\| \begin{pmatrix} \cosh(\tilde{g}_{\text{Zhom}}(q)) & \tilde{Z}(q) * \sinh(\tilde{g}_{\text{Zhom}}(q)) \\ (1/\tilde{Z}(q)) * \sinh(\tilde{g}_{\text{Zhom}}(q)) & \cosh(\tilde{g}_{\text{Zhom}}(q)) \end{pmatrix} \right\| \quad (10)$$

Die Matrix einer Einzelschicht ist demnach durch zwei voneinander unabhängige komplexe Größen bzw. durch vier voneinander unabhängige reelle Größen bestimmt.

Ist innerhalb einer Planplatte die komplette Brechzahl $\tilde{n} = (n - i * k)$ eine kontinuierliche Funktion des Ortes, so ist das Medium als optisch inhomogen zu bezeichnen. Es sei dabei hier zur Vereinfachung vorausgesetzt, daß die Gradienten sowohl des Realteils als auch des Imaginärteils von \tilde{n} senkrecht stehen auf den Begrenzungsflächen der Planplatte.

In bezug auf die Berechnung von Transmission und Reflexion ist zunächst zu unterscheiden, ob in dem Medium ausschließlich, d.h. an jeder Stelle, „schwache Absorption“, d.h. $k < (0,1 * n)$ herrscht oder nicht. Bei ausschließlich schwacher Absorption ist eine mathematische Behandlung der optischen Wellenausbreitung in der Planplatte im Sinne der „geometrisch-optischen Näherung“ möglich. D.h., daß die Rechnungen, entsprechend dem Gebrauch des Eikonals, nur den optischen Weg als Integral über $n(x)$ enthalten und dabei die Dämpfungsfunktion im Sinne des Lambertschen Gesetzes im Exponenten der e-Funktion nur das Integral über $k(x)$ enthält. Insbesondere zeigt sich bei schwacher Absorption das Phänomen der „inneren Reflexion“ an Brechzahlgradienten nicht.

Bei „starker Absorption“ – dieser Fall wird häufig auch als „metallische Absorption“ bezeichnet –, wenn also gilt $k \geq (0,1 * n)$, müssen jedoch Reflexion und Transmission mit Hilfe der Integration der Wellengleichung unter Einsatz der jetzt ortsabhängigen komplexen Phasengeschwindigkeit $\tilde{u}(x) = c / \tilde{n}(x)$ und unter Berücksichtigung der Randbedingungen berechnet werden. Diese Integration kann jedoch nur in wenigen Fällen, z.B. bei einem sogen. Rayleigh-Profil der Brechzahl, analytisch erfolgen [17]. Im allgemeinen muß man auf eine numerische Integration zurückgreifen, bei der die Wellengleichung als partielle Differentialgleichung zeitlich und räumlich diskretisiert wird. Die Wahl der Schrittweiten, u.U. in Anpassung an den jeweils vorliegenden Gradienten als Funktion des Ortes, also mit geeigneter Schrittweitensteuerung, bestimmt dabei die Genauigkeit des Endresultates.

Der inhomogene Fall unter Einschluß starker Absorption kann mit gleicher Genauigkeit auch mit Hilfe der Matrizenmethodik behandelt werden: Die kontinuierliche Ortsfunktion der komplexen Brechzahl wird durch eine hinreichend fein unterteilte Stufenfunktion approximiert. Insofern ähnelt das Matrizenverfahren dem der numerischen Integration der Wellengleichung. Man faßt damit das optisch inhomogene System als ein diesbezügliches Schichtsystem auf und bildet aus den Matrizen der in sich homogenen Einzelschichten, die die Stufenfunktion liefert, das geordnete Produkt zur resultierenden Matrix. Auf diese Weise wird auch die tatsächlich existierende innere Reflexion an Brechzahlgradienten richtig erfaßt.

Die u.U. große Zahl der Einzelmatrizen bedeutet dank der Unterstützung durch moderne Elektronenrechner kaum eine Einschränkung der praktischen Anwendung der Matrizenmethodik in der geschilderten Weise. Die Anwendung speziell der E-H-Matrizenmethodik bedeutet jedoch gerade diesbezüglich jetzt eine deutliche Rechenzeitverkürzung, weil die Anzahl der Matrizenmultiplikationen gegenüber der E^+E^- -Matrizenmethodik praktisch nur halb so groß ist.

Naturgemäß schließen beide Rechnungsmethoden für den Fall „mit starker Absorption“ auch die Fälle bzw. die Probenbereiche „mit schwacher Absorption“ ein.

Zur Diskussion des inversen Problems soll zunächst geklärt werden, ob eine resultierende Matrix in eindeutiger Weise auf die Einzelmatrizen, deren Produkt sie darstellt, zurückgeführt werden kann, oder ob mehrere Faktorzerlegungen existieren. Dabei geht es letztlich jedoch nicht um die Frage der rein mathematisch möglichen Vielfalt, sondern um die Frage der Mehrdeutigkeit im Rahmen physikalischer Realisierbarkeit in bezug auf die dabei auftretenden dispersiven Materialparameter zur erforderlichen Darstellung der komplexen Brechzahl und des komplexen Wellenwiderstandes. Dazu wird im folgenden Abschnitt als erstes der Fall der Variation von nur zwei Matrizen innerhalb des Matrizenproduktes ins Auge gefaßt.

2.) Veränderung zweier Schichtparameter mit „Paarkompensation“

Die resultierende Matrix $||MX||$ sei das Ergebnis der Multiplikation einer bestimmten Anzahl „J“ von Matrizen, die in Stufenapproximation einen inhomogenen Verlauf der komplexen Brechzahl $n(x)$ erfassen¹⁾:

$$MX = \underbrace{MJ * M}_{Mc} \underbrace{(J-1) * \dots}_{Mb} * MB * \underbrace{\dots * MA}_{Ma} * \dots M1 \quad (11)$$

Zur Untersuchung der Frage, ob bei Abänderung zweier beliebiger Matrizen die resultierende Matrix ungeändert bleiben kann, seien z.B. die beiden Matrizen MA und MB herausgegriffen.

¹⁾ Hier und im folgenden werden zur Vereinfachung der Schreibweise die üblichen vertikalen Doppelstriche zur Kennzeichnung einer Matrix weggelassen, wenn das Verständnis dadurch nicht beeinträchtigt wird.

Bei einer Veränderung von MA in MA' ist eine entsprechend kompensierende Änderung von MB in MB' gesucht, so daß MX ungeändert bleibt. Da sich das Matrizenprodukt durch 5 Einzelmatriizen ausdrücken läßt [s. Gl. (11)], wobei die Matrizen Ma , Mb und Mc die entsprechenden Teilfaktoren zusammenfassen, soll also gelten:

$$MX = Mc * MB' * Mb * MA' * Ma \quad (12)$$

MB' ist damit eindeutig bestimmt zu:

$$MB' = Mc^{-1} * MX * (Mb * MA' * Ma)^{-1} \quad (13)$$

Ein eindeutiger Rückschluß von einer gegebenen resultierenden Matrix MX auf ein Matrizenprodukt mit bestimmten Faktoren ist also nicht möglich. Da die drei unabhängigen komplexen Größen, die die resultierende Matrix bestimmen (denn es gilt $\text{DET}(MX) = 1$, s. oben), ihrerseits eindeutig in Verbindung stehen mit den beiden resultierenden komplexen Reflexionsfaktoren $\tilde{r}_{\text{res}}(A \rightarrow B)$ und $\tilde{r}_{\text{res}}(B \rightarrow A)$ sowie mit dem resultierenden Transmissionsfaktor $\tilde{t}_{\text{res}}(A \leftrightarrow B)$, ist auch aus diesen drei Spektralwerten des optischen Verhaltens der inhomogenen Schicht kein eindeutiger Rückschluß auf ein Matrizenprodukt mit bestimmten Faktoren möglich. – Zur Frage, ob bzw. unter welchen Bedingungen aus den realen optischen Meßwerten für die resultierenden Intensitätsverhältnisse, das sind die Reflexionsgrade $R_{\text{res}}(A \rightarrow B)$ und $R_{\text{res}}(B \rightarrow A)$ sowie der Transmissionsgrad $T_{\text{res}}(A \leftrightarrow B)$, die resultierende Matrix ermittelt werden kann, sei auf die Literaturstelle [18] verwiesen.

Zur Frage der möglichen Abänderung zweier Schichten in bezug auf ihre Brechzahlwerte und Dicken bei ungeänderter resultierender Matrix ist zunächst zu fragen, ob bei der Abänderung von MA nach MA' die kompensierende Matrix MB' überhaupt noch eine homogene Schicht repräsentiert. Dazu muß MB' ebenfalls widerstandssymmetrisch (zur Definition siehe oben) sein. Es sei bemerkt, daß sich MB' in jedem Fall als übertragungssymmetrisch (zur Definition siehe oben) ergibt, da die dazu notwendige Bedingung $\text{DET}(MB') = 1$ aus formalen Gründen, d.h. notwendigerweise erfüllt bleibt.

Bei einem vorgegebenen Dispersionsmechanismus zur Ausprägung der jeweils örtlich geltenden komplexen Brechzahl auf mikrophysikalischer Basis bleiben zur endgültigen Einschätzung der Eindeutigkeit für die Rückauflösung von MX dann noch die beiden folgenden Fragen offen:

- a) Wenn auch die Abänderung von MA in MA' im Rahmen der Mikrophysik des Dispersionsmechanismus erfolgt, die Parameterwahl dazu also als real möglich erscheint und MB' eine optisch homogene Schicht repräsentiert, so bleibt doch zu fragen, ob die dann notwendige Abänderung von MB nach MB' physikalisch sinnvoll, d.h. eine entsprechende Variation der mikrophysikalischen Parameter überhaupt realisierbar ist. Als Beispiel formuliert kann man etwa wie folgt fragen: Ist die komplexe Brechzahl durch freie Ladungsträger in einem ansonsten absorptionsfreien Halbleiter nach dem Drude-Modell bestimmt und ändert man an der Stelle der Matrix MA die Konzentration der freien Ladungsträger um 10%, läßt sich dann die notwendige Variation der Matrix von MB nach MB' dadurch realisieren, daß an der zugeordnete

ten lokalen Stelle von MB die Konzentration freier Ladungsträger in einem physikalisch vertretbaren Maße geändert wird.

- b) Wenn eine Änderung von MA nach MA' und eine entsprechende Kompensation durch Variation von MB nach MB' im Sinne von a) für eine feste Lichtwellenlänge tatsächlich realisierbar ist, so daß MX und damit die resultierende Reflexion und die resultierende Transmission bei gegebenen Begrenzungsmedien ungeändert erscheinen, so bleibt die Frage offen, ob dann MX noch die gleiche Spektralabhängigkeit wie zuvor besitzt.

Eine Beispielrechnung zu diesen Fragen der „Paarkompensation“ wurde auf der Basis des Drude-Modells für einen Halbleiter durchgeführt und lieferte insofern ein negatives Resultat, als sich die Kompensationsmatrix MB' als widerstandsunsymmetrisch ergab, wenn MA durch Variation der Trägerkonzentration den abgeänderten Wert MA' erhielt (s. Anlage A1). Die Matrix MB' kann damit nicht mehr auf eine homogene Schicht bzw. deren Parameter zurückgeführt werden. Damit erübrigt sich die Überprüfung der Frage, ob für MB' die Parameterquantitäten sinnvoll bleiben und der Erhalt der Kompensation bei Änderung der Wellenlänge gegeben ist.

Unter Verweis auf den folgenden Abschnitt II, 3. ist zu bemerken, daß jede widerstandsunsymmetrische Matrix als das Produkt zweier Matrizen dargestellt werden kann, die ihrerseits je einer homogenen Schicht zugeordnet werden können, also eine „Paardarstellung“ möglich ist. Die dort erscheinenden mikrophysikalischen Parameter entsprechen jedoch einerseits nicht mehr generell dem vorgegebenen Dispersionsmodell, so daß andererseits auch keine spektral unabhängige Kompensation gegeben ist.

Zusammenfassend kann man zu diesem Abschnitt feststellen, daß eine resultierende Matrix nicht generell dadurch auf mehrfache Art dargestellt werden kann, daß die Parameter zweier Schichten geändert werden, wenn vorausgesetzt wird, daß jede Einzelmatrix eine homogene Schicht in ihrem optischen Verhalten repräsentiert.

Insofern erübrigt sich die Klärung der Frage, ob dabei die Brechzahlvariationen physikalisch sinnvoll bzw. innerhalb eines gegebenen Dispersionsmodells physikalisch realisierbar sind und die spektralen Abhängigkeiten erhalten bleiben.

Dies alles spricht für eine Eindeutigkeit der Inversion. Eine Argumentation aufgrund der Untersuchung der „Paarkompensation“ stellt allerdings noch keinen strengen Eindeutigkeitsbeweis für die Inversion dar.

3.) Paardarstellung der resultierenden Matrix

Die resultierende Matrix $||MX||$ ist definitionsgemäß das Produkt von zwei oder mehr Einzelmatrizen, die je eine homogene Schicht mit unterschiedlichen materialspezifischen Parametern repräsentieren. Damit ist MX i. allg. widerstandsunsymmetrisch. Deswegen kann umgekehrt aufgrund der Widerstandsunsymmetrie also eine resultierende Matrix i. allg. nicht ihrerseits durch eine homogene Einzelschicht repräsentiert werden.

Eine entsprechende äquivalente Darstellung gelingt jedoch stets durch zwei Matrizen für homogene Einzelschichten, denn es gilt der

Satz: Jede (2,2)-Matrix $||MX||$ mit komplexen Koeffizienten, deren Determinante gleich Eins ist, läßt sich als das Produkt zweier (2,2)-Matrizen $||MB||$ und $||MA||$ darstellen („Paardarstellung“):

$$MX = MB * MA \quad (14)$$

wobei für beide Matrizen MA und MB mit komplexen Koeffizienten jeweils einzeln gilt:

- a) die Determinante besitzt den Wert 1,
- b) die Koeffizienten der Hauptdiagonale haben den gleichen Wert und
- c) es besteht die Beziehung:

$$\cosh(\operatorname{ar sinh}(\sqrt{m_{12} * m_{21}})) = m_{11}.$$

Eineindeutigkeit dieser Paardarstellung wäre jedoch nur dann gegeben, wenn die vier komplexen Koeffizienten von MX unabhängig voneinander sind. Da gilt $\operatorname{DET}(|MX|) = 1$, so existieren nur drei voneinander unabhängige komplexe Koeffizienten. Damit ist ein und nur ein beliebiger komplexer Koeffizient der Matrizen MA und MB frei wählbar. Es existieren deshalb unendlich viele Paardarstellungen der genannten Art.

Zur Erläuterung/Beweisführung sei ausgeführt:

Die Auflösung der Produktgleichung liefert 3 komplexe Gleichungen, die zur Bestimmung der vier voneinander unabhängigen komplexen Koeffizienten der Matrizen MA und MB herangezogen werden können, denn es lassen sich diese Gleichungen so ineinander einsetzen, daß aus der bekannten Matrix MX:

- 1.) Bei Vorgabe von m_{21} der Matrizenkoeffizient m_{b21} ,
- 2.) mit m_{21} und m_{b21} der Koeffizient m_{11} und
- 3.) mit m_{11} der Koeffizient m_{b11}

berechnet werden können. – Die entsprechenden Gleichungen dazu sind im Anhang A2 angegeben.

Aus der Determinantenbeziehung für MA und MB ergeben sich dann sowohl m_{a21} als auch m_{b21} . Damit ist die Paardarstellung in der gesuchten Weise gegeben.

Zu den beiden Vierpolparametern für das „Ersatzmedium“ der homogenen Schicht „A“, das ist der Wellenwiderstand $\tilde{Z}(A)$ und das Betriebsübertragungsmaß $\tilde{g}_Z = i * \tilde{\alpha}$, gelangt man durch die Beziehungen:

$$\begin{aligned} \tilde{Z}(A) &= \sqrt{m_{a12}/m_{a21}} \text{ und} \\ \tilde{g}_Z(A) &= i * \tilde{\alpha}(A) = \operatorname{ar sinh}(m_{12}/\tilde{Z}(A)) = \operatorname{ar cosh}(m_{11}) \end{aligned} \quad (15)$$

Dabei ist die notwendige Gleichheit von

$$\operatorname{ar sinh}(m_{12}/\tilde{Z}(A)) = \operatorname{ar cosh}(m_{11}) \quad (16)$$

auszunutzen, um aus den von den Elektronenrechnern zurückgegebenen speziellen Lösungen für $i * \tilde{\alpha}$ zur Bestimmung des Faktors n_1 zu kommen, der in den allgemeinen Lösungen der Areafunktionen auftritt:

$$\begin{aligned}\ar \sinh (\tilde{X})_{\text{allgemein}} &= \ar \sinh (\tilde{X})_{\text{speziell}} * (-1)^{n1} + \pi * n1 \\ \ar \cosh (\tilde{X})_{\text{allgemein}} &= (+-1) * \ar \cosh (\tilde{X})_{\text{speziell}} + 2 * \pi * n1\end{aligned}\quad (17)$$

Bis auf ganzzahlige Vielfache von $2 * \pi$ ist damit $i * \tilde{\alpha}$ eindeutig bestimmt.

Das Analoge gilt für das Ersatzmedium der Schicht „B“.

Diese beiden komplexen Materialgrößen \tilde{Z} (A) und $i * \tilde{\alpha}$ (A) bzw. \tilde{Z} (B) und $i * \tilde{\alpha}$ (B) besitzen in bezug auf die beiden komplexen Materialgrößen $\tilde{\epsilon}_{\text{rel}}$ und $\tilde{\mu}_{\text{rel}}$ der Maxwell'schen Gleichungen und unter Einbezug der Schichtdicke (siehe oben) jedoch noch insofern einen inneren Zusammenhang, als in $i * \tilde{\alpha}$ das Produkt aus komplexer Brechzahl \tilde{n} und Schichtdicke d auf den Wellenwiderstand und die relative Permeabilität zurückgeführt werden kann:

$$\tilde{n} * d = Z_o * (1/\tilde{Z}) * \tilde{\mu}_{\text{rel}} * d \quad (18).$$

Man hat nun drei Materialfälle zu unterscheiden:

- a) $\tilde{\mu}_{\text{rel}} = 1$. Dieser Fall ist im optischen Spektralbereich der häufigste. Hierin gehören alle amagnetischen Materialien (nicht-ferromagnetische Metalle, Halbleiter und Isolatoren) und meist auch die ferromagnetischen Metalle und Halbleiter, denn i. allg. sind die magnetischen Polarisationsmechanismen zu träge, um im Magnetfeld der elektromagnetischen Welle bei optischen Frequenzen einen merklichen Einfluß auf die magnetische Flußdichte \vec{B} (in $\text{m}^2/\text{V} * \text{sec}$) zu haben. Der Wellenwiderstand ist dann über die spezielle Form der

$$\text{Maxwellschen Relation bei } \tilde{\mu}_{\text{rel}} = 1 : n = \sqrt{\tilde{\epsilon}_{\text{rel}}} \quad (19)$$

unmittelbar mit der Brechzahl verknüpft durch die Beziehung:

$$\tilde{Z} = Z_o / \tilde{n} \quad (20).$$

Der Wellenwiderstand \tilde{Z} (q) liefert dann also unmittelbar die Brechzahl \tilde{n} (q), und unter Einsatz von \tilde{Z} (q) liefert $i * \tilde{\alpha}$ (q) unmittelbar die Schichtdicke d (q) der homogenen Ersatzschicht mit der Indizierung „q“.

- b) $\tilde{\mu}_{\text{rel}}$ ist von Eins verschieden und komplex. Es handelt sich dann um den allgemeinsten Fall, der z.B. bei ferromagnetischen Materialien auftritt, die auch bei optischen Frequenzen nicht nur einen merklichen Realteil der Permeabilität besitzen, sondern auch eine diesbezüglich nicht vernachlässigbare Dämpfung, so daß auch ein Imaginärteil der Permeabilität zu berücksichtigen ist. Die dazu gehörigen mikrophysikalischen Prozesse könnten z.B. in einer magnetischen Magnonenanregung in ferromagnetischen Metallen bzw. Ferriten oder in einer optischen Anregung in semimagnetischen Halbleitern begründet sein. – In diesem Fall bleibt es pro Matrix bei zwei komplexen Materialgrößen \tilde{Z} und $i * \tilde{\alpha}$ bzw. $(\tilde{\epsilon}_{\text{rel}} * d)$ und $(\tilde{\mu}_{\text{rel}} * d)$. Die Absolutbeträge von $\tilde{\epsilon}_{\text{rel}}$ und $\tilde{\mu}_{\text{rel}}$ können also nur bis auf einen reellen Faktor angegeben werden, der durch eine entsprechende Schichtdicke kompensiert werden kann.
- c) $\tilde{\mu}_{\text{rel}}$ ist reell, jedoch von Eins verschieden. In diesem Fall ist eine Unterscheidung vom Fall a) für amagnetische Materie nicht möglich, denn eine

$$\text{effektive Brechzahl } \tilde{n}_{\text{eff}} = Z_0 / \tilde{Z} \quad (21)$$

und eine reelle

$$\text{effektive Schichtdicke } d_{\text{eff}} = \mu_{\text{rel}} * d \quad (22)$$

führen zusammen mit $\mu_{\text{rel}} = 1$ zum gleichen optischen Übertragungsverhalten. Dazu führt die aus Gl. (8) und Gl. (9) folgende Beziehung:

$$\tilde{n} * d = \sqrt{\tilde{\epsilon}_{\text{rel}} * \tilde{\mu}_{\text{rel}}} * d = (Z_0 / \tilde{Z}) * \mu_{\text{rel}} * d \quad (23)$$

Die Diskussion der möglichen „Paardarstellung“ einer resultierenden Matrix ist insofern von übergeordnetem Interesse, als sich dabei herausstellt, daß dem Prinzip nach das optische Verhalten eines hochzahligen Schichtsystems bzw. einer inhomogenen Schicht mit beliebigem Brechzahlprofil durch nur zwei homogene Schichten exakt „nachgebildet“ werden kann, wenigstens für eine Wellenlänge. Dabei kann die Wahl der Schichtdicke in gewissem Umfang materialspezifische Größen kompensieren. – Man kann sich vorstellen, daß eine derartige Paardarstellung u.U. die technische Realisierbarkeit eines bestimmten optischen Verhaltens erleichtert.

Natürlich bleiben auch hier die bereits früher genannten zwei Fragen offen:

- 1.) Sind bei fester Wellenlänge die zur Paardarstellung erforderlichen materialspezifischen Größen überhaupt „machbar“, d.h. sind entsprechende physikalische Dispersionsmechanismen bekannt bzw. können bei gegebenen Dispersionsmechanismen (z.B. nach dem Drude-Modell für freie Ladungsträger in Halbleitern) durch Parametervariation (z.B. durch Veränderung der Konzentration der freien Ladungsträger) die erforderlichen Werte erreicht werden.
- 2.) Ist die Paardarstellung bei einer (!) Wellenlänge gelungen, besitzt dann die Paardarstellung von MX die gleiche spektrale Abhängigkeit wie MX, d.h. liefert die Paardarstellung von MX die gleichen Spektren von resultierendem Reflexions- (beidseitig) und Transmissionsgrad wie zuvor MX?

4.) Paardarstellung mit einer amagnetischen Schicht

Die Paardarstellung einer beliebigen resultierenden Matrix, die ihrerseits ein ganzes Schichtsystem, bzw. ein inhomogenes Brechzahlprofil in einer Schicht, optisch gesehen repräsentiert, kann, wie ausgeführt wurde, auf unendlich vielfache Weise erfolgen, weil einer der Koeffizienten der Paar-Matrizen MA und MB, im Beispiel ist es der Koeffizient ma_{21} , beliebig vorgegeben werden kann.

Es hat sich gezeigt, daß diese Vorgabe so gewählt werden kann, daß für das Medium der Matrix MA gilt: $\text{Im}\{\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A)\} = 0$. Damit erscheint dieses Medium „A“ ohne magnetische Dämpfung. In diesem Fall ist aber (siehe oben Fall c)) diese Materie in gleichwertiger Weise als amagnetisch mit $\tilde{\mu}_{\text{rel}} = 1$ auffaßbar, wenn die Brechzahl durch die effektive Brechzahl „ \tilde{n}_{eff} “ nach Gl. (21) und die Schichtdicke durch die effektive Schichtdicke „ d_{eff} “ nach Gl. (22) ersetzt werden. Auf diese Weise ist offensichtlich eine Paardarstellung derart möglich, daß eines der beteiligten „Ersatzmedien“ zur Gruppe der nichtmagnetischen Metalle, Halbleiter oder Isolatoren gehört.

Ob eine Vorgabe von ma_{21} sogar in der Weise erfolgen kann, daß beide (!) Ersatzmedien amagnetisch sein können, ist noch nicht überprüft worden.

Eine direkte analytische Ableitung des Koeffizienten ma_{21} derart, daß $\text{Im}\{\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A)\} = 0$ ist, erscheint wegen der komplizierten mathematischen Zusammenhänge nicht möglich. Erreichbar ist jedoch dieses Ziel im Sinne der Lösung der entsprechenden „Optimierungsaufgabe“. Dazu wäre ein entsprechendes numerisches Anpassungsprogramm mit geeigneter Suchstrategie zu programmieren.

Die vorliegenden Beispielrechnungen zu dieser Problematik beruhen jedoch auf einer anderen Vorgehensweise, nämlich der der „zweidimensionalen“ Abrasterung von ma_{21} , d.h. der Abrasterung von $\text{Re}\{ma_{21}\}$ und $\text{Im}\{ma_{21}\}$ und der Suche nach Stellen mit einem Nulldurchgang von $\text{Im}\{\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A)\} = 0$.

Statt ma_{21} selbst mit einem doppelt parallellaufenden Zufallsgenerator zweidimensional abzurastern, wurde hier $\tilde{n}(A)$, d.h. $\text{Re}\{\tilde{n}(A)\}$ und $\text{Im}\{\tilde{n}(A)\}$ je statistisch unabhängig abgerastert. Auf diese Weise konnte sichergestellt werden, daß die verwendeten Werte von $\tilde{n}(A)$ im Rahmen einer physikalisch sinnvollen Variationsbreite für einen Halbleiter mit Dispersion nach dem Drude-Modell realisierbar bleiben.

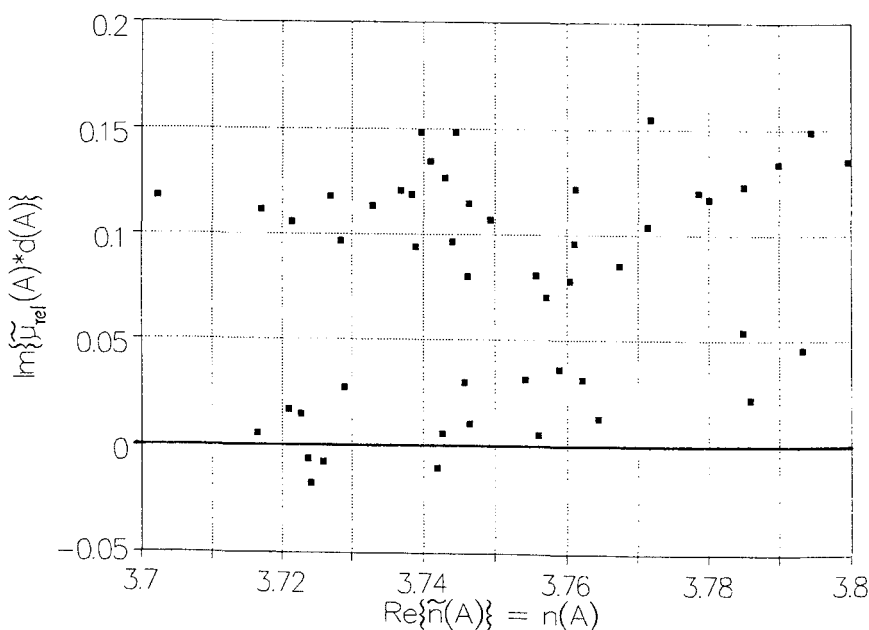


Abb. 1

Darstellung der Abrasterung des funktionalen Zusammenhanges

$\text{Im}\{\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A) * d(A)\} = f[\text{Re}\{\tilde{n}(A)\}]$ bei ebenfalls statistischer Variation von $\text{Im}\{\tilde{n}(A)\}$ im Rahmen der „Paardarstellung“ einer resultierenden Matrix $||MX||$ durch das Produkt $||MB|| * ||MA||$ mit amagnetischem Material „A“. Zur Erläuterung siehe Text in Abschnitt II, 4.) und Anhang A3.

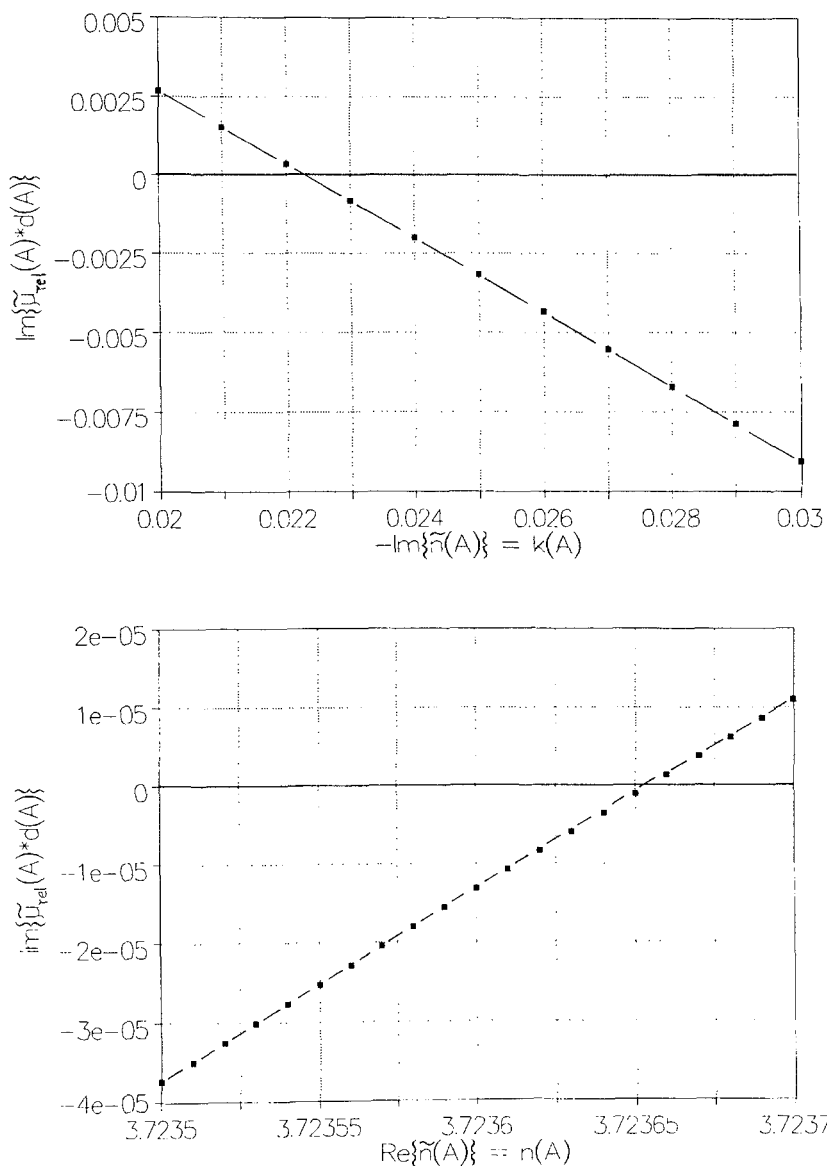


Abb. 2

Nullstellenbestimmung von $\text{Im}\{\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A) \cdot d(A)\}$ im Rahmen der „Paardarstellung“ einer resultierenden Matrix $||MX||$ durch das Produkt $||MB|| \cdot ||MA||$ mit magnetischem Material „A“ mittels:

a) (oben) Variation von $\text{Im}\{\tilde{n}(A)\}$ bei $\text{Re}\{\tilde{n}(A)\} = \text{const.}$

b) (unten) Variation von $\text{Re}\{\tilde{n}(A)\}$ bei $\text{Im}\{\tilde{n}(A)\} = \text{const.}$

Zur Erläuterung siehe Text in Abschnitt II, 4.) und Anhang A3.

Diese Rechnungen haben ergeben, daß tatsächlich $\text{Im}\{\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A)\}$ innerhalb der abgetasteten Intervalle für $\text{Re}\{\tilde{n}(A)\}$ und $\text{Im}\{\tilde{n}(A)\}$ das Vorzeichen wechselt, also eine Nullstelle existiert. Es existierten im Beispiel (s. Abb. 1) sogar überraschenderweise eine Vielzahl von Nullstellen, deren gesetzmäßige Lage in der komplexen $\tilde{n}(A)$ -Ebene allerdings noch näher zu untersuchen ist.

In der Nähe einer herausgegriffenen Nullstelle kann durch schrittweise Variation von $\text{Re}\{\tilde{n}(A)\}$ oder $\text{Im}\{\tilde{n}(A)\}$ der Nulldurchgang von $\text{Im}\{\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A)\}$ verfolgt werden (siehe dazu Abb. 2a und 2b). Im Nulldurchgang selbst ist dann die gesuchte Bedingung erfüllt und die Paardarstellung mit einer amagnetischen Schicht „A“ gelungen.

Im Anhang A2 ist das Rechenbeispiel zu den Abb. 1 und 2 näher erläutert. Die sich für diese Schicht „A“ ergebenden Materialparameter, das ist neben der effektiven Schichtdicke insbesondere die sich im Sinne der Maxwellschen Relation als Wurzel aus der relativen effektiven DK ergebende effektive komplexe Brechzahl, erscheinen keineswegs „pathologisch“. Sie lauten:

$$\begin{aligned} d_{\text{eff.}}(A) &= 1,957 \text{ } [\mu\text{m}] \\ \tilde{n}_{\text{eff}}(A) &= (3,521; -2,539\text{E-}2) \end{aligned} \quad (23)$$

Eine entsprechende Realisierung im Drudemodell der Dispersion eines Halbleiters ist bei der gegebenen Vakuum-Wellenlänge $\lambda = 10 \text{ } [\mu\text{m}]$ auf der Basis der folgenden mikrophysikalischen Parameter möglich:

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_{\text{rel, Wirt}} &= 12,66 \\ \text{Konzentration fr. Ladungsträger } N &= 1,945\text{E}18 \text{ } [1/\text{cm}^{-3}] \\ \text{Stoßzeit } \tau &= 7,8\text{E-}15 \text{ } [\text{sec}] \\ \text{effektive Masse} &= 0,45 * m_0; m_0 = \text{Elektronenruhmasse} \end{aligned} \quad (24)$$

Die Materialparameter der Schicht „B“ ergaben sich dabei im vorliegenden Rechenbeispiel wie folgt:

$$\begin{aligned} \tilde{Z}(B) &= (102,99; 7,970) \text{ } [\text{Ohm}] \\ \tilde{n}(B) * d(B) &= (0,3514; -0,9026) \text{ } [\mu\text{m}] \\ \tilde{\mu}_{\text{rel}}(B) * d(B) &= (0,1151; -0,2392) \text{ } [\mu\text{m}] \end{aligned} \quad (25)$$

Die Permeabilität $\tilde{\mu}_{\text{rel}}(B) * d(B)$ besitzt also einen von Null verschiedenen Imaginärteil. Immerhin ist dieser Imaginärteil negativ, wie es einer realen magnetischen Dämpfung entspricht.

Bei geeigneter Wahl der Schichtdicke $d(B)$ liegen die erforderlichen materialspezifischen Werte $\tilde{n}(B)$ und $\tilde{\mu}_{\text{rel}}(B)$ durchaus in einem physikalisch realen Größenbereich.

Es sei bemerkt, daß sich nun in Iteration die Schichtmatrix MB in analoger Operation wieder in eine Paardarstellung umformen läßt, wobei die eine der dabei auftretenden Matrizen nochmals so konstruiert ist, daß sie einem amagnetischen Schichtmaterial zuzuordnen ist. – Schließlich ergibt sich durch diese wiederholte Paardarstellung eine neue Art der Produktdarstellung der Ausgangsmatrix MX. – Die Frage, ob eine derartige Darstellung insofern mit einer endlichen Anzahl an Faktoren konvergiert, daß ausschließlich eine Zuordnung zu amagnetischer Materie existiert, ist noch zu klären.

Wie das Rechenbeispiel gezeigt hat, liegen die erforderlichen Schichtparameter bei der Paardarstellung einer resultierenden Matrix nicht allgemein im Rahmen eines einheitlichen und physikalisch relevanten Dispersionsmodells und der dadurch gegebenen Wellenlängenabhängigkeit. Eine Paardarstellung scheidet danach i. allg. als Inversionsvariante aus, so daß ein weiteres Argument für die Eineindeutigkeit der Inversion optischer Spektren gewonnen wurde, wenn der verantwortliche Dispersionsmechanismus bekannt ist und z.B. nur ein einziger Inhomogenitätsparameter variiert.

III Inhomogenitätsbestimmung durch Stützstellenanpassung

1.) Grundsätzliches

Wie oben bereits ausgeführt wurde, ist die Berechnung der optischen Spektren von beidseitiger Reflexion und Transmission bei einem planparallelen Schichtsystem und bei einer Planplatte mit darin kontinuierlich variierender komplexer Brechzahl insofern mathematisch-methodisch gleichwertig mit Hilfe der Matrizenrechnung zu behandeln, als in beiden Fällen bei gegebener Wellenlänge eine endliche Zahl von Matrizen, je für eine homogene Schicht gegebener komplexer Brechzahl, miteinander multipliziert werden.

Es liegt also nahe, die Inversion, d.h. die Inhomogenitätsbestimmung aus den gemessenen Spektren, als „Optimierungsaufgabe“ aufzufassen, bei der aus einer endlichen Zahl von Spektralwerten die relevanten Inhomogenitätsparameter durch eine numerische Anpassungsrechnung mit hinreichender Genauigkeit bestimmt werden. Moderne Elektronenrechner mit standardisierten Programmen bewältigen derartige Aufgaben routinemäßig.

Die praktische Problematik besteht jedoch:

- Aa) in der zweckmäßigen Auswahl der angebotenen „Suchstrategien“ zur rasch konvergierenden Minimierung der verbleibenden Fehlerquadratsumme, gebildet aus der Differenz zwischen den vorgegebenen Meßspektren und den in Vorwärtsrechnung jeweils neu berechneten Spektren unter Verwendung der in jedem Iterationsschritt „versuchsweise“ angenommenen Parameter,
- Ab) in der zweckmäßigen Anzahl und Auswahl der verwendeten Wellenlängenwerte,
- Ac) in der zweckmäßigen Anzahl und Auswahl der anzupassenden Parameter und
- Ad) in der zweckmäßigen, d.h. sinnvollen Vorgabe des tolerierten Minimalwertes für die verbleibende Fehlerquadratsumme.

Die „Zweckmäßigkeit“ richtet sich dabei nach

- Ba) der gewünschten physikalischen Aussage über die Art des Inhomogenitätsprofils,
- Bb) dem möglichen Zeitaufwand für die Rechnung und
- Bc) der gegebenen Meßgenauigkeit für das gegebene Meßspektrum.

Die Wellenlängenwerte sind in jedem Fall dann für die Lösung der Optimierungsaufgabe „günstig“ gewählt, wenn damit eine möglichst charakteristische spektrale Variation

erfaßt wird. Bei Halbleitern mit freien Ladungsträgern sollte z.B. das spektrale Minimum der Reflexion in der Nähe der Plasmaresonanz abgedeckt werden. Dazu gehört auch, daß spektrale Transmissionswerte existieren und nicht zu klein sind.

Was die gesuchten Parameter angeht, so könnte man lokale Werte von Real- und Imaginärteil der Brechzahl wählen, wobei deren Abstand in bezug auf die zu erwartende Tiefenfunktion der Brechzahlvariation eine hinreichende Ortsauflösung garantiert. Mit der Anpassung des Brechzahlprofils wäre zwar eine phänomenologisch-optische Lösung des Problems gelungen, jedoch zunächst noch keine unmittelbar verwendbare mikrophysikalische Interpretation gewonnen.

Die Anpassungsparameter könnten auch unmittelbar mikrophysikalische Dispersionsparameter sein, wenn der Dispersionsmechanismus bekannt oder versuchsweise vorgegeben ist. Dabei können pro Ortspunkt sogar mehrere mikrophysikalische Parameter angepaßt werden, da die Optimierungsprozedur i. allg. jeden Parameter unabhängig von anderen behandelt. Bei mehreren mikrophysikalischen Parametern pro Ortspunkt ist jedoch darauf zu achten, daß sich nicht zwei oder mehr Parameter gegenseitig kompensieren. In einem solchen Fall würde die Optimierung schlecht oder gar nicht konvergieren.

Die Anzahl der Ortspunkte in Zuordnung zum Inhomogenitätsprofil kann u.U. kleiner sein als die Zahl der Schichten zur Berechnung der Spektren mit Hilfe der Matrizenmethode. Dies bietet sich an, um den Rechenaufwand bei der Optimierung zu vermindern. In diesem Fall nehmen die angepaßten Ortswerte den Charakter von primären Stützstellen an, und die benötigten Zwischenwerte für die Spektralberechnungen werden durch numerische Interpolation gewonnen, z.B. unter Verwendung kubischer Splines.

Die zweckmäßige Vorgabe der noch tolerierten Fehlerquadratsumme für die Optimierung sollte sich an der experimentell gegebenen Meßgenauigkeit orientieren. Da bei optisch-spektralen Messungen Genauigkeiten von 0,1% kaum zu unterschreiten sind, fiel die Fehlerquadratsumme gemessen an den numerisch-mathematischen Prozeduren bei der üblichen Optimierung auffällig groß aus. Dies führt naturgemäß u.U. zu erheblichen Ungenauigkeiten in der Parameterbestimmung für einen Ortspunkt, da die Fehlerquadratsumme aus den Abweichungen für alle verwendeten Wellenlängenzpunkte gebildet wird. Bei einer hinlänglich spektralen Breite und darin drei Spektren können sich außerdem Fehler in ausgedehnteren Spektralbereichen u.U. „kompensieren“, d.h. an wechselnden spektralen Stellen auftreten. Zur notwendigen Einschätzung der erzielten bzw. erzielbaren Genauigkeit bieten sich umfangreichere Modellrechnungen an, die dann offenlegen, welche Parameter bzw. Spektralbereiche höhere oder niedrigere spezifische „Empfindlichkeiten“ besitzen.

In den beiden folgenden Beispielen für einerseits eine Brechzahlanpassung und andererseits die Anpassung eines mikrophysikalischen Parameters wird die Optimierungsmethode nach Powell [19] verwendet. Sie ist als Unterprogramm in dem Werk „Numerical Recipes“ [4] verfügbar, in dem auch andere Optimierungsstrategien kritisch diskutiert werden. Das in FORTRAN 77 geschriebene Hauptprogramm, in dem das genannte Unterprogramm aufgerufen wird, wurde selbst geschrieben und mit Hilfe eines Intel-386 SX-Prozessors abgearbeitet. Die sich dabei ergebenden Rechenzeiten liegen für die verwendete relativ geringe Zahl an primären Stützstellen und Iterationen in der Größenordnung von 100 Minuten.

Die anzupassenden „Meßspektren“ wurde für die Beispiele ihrerseits numerisch berechnet. Deshalb kann der tolerierte Maximalfehler bei der Optimierung gegenüber einer Verwendung experimenteller Spektren drastisch reduziert werden. Das wiederum gestattet es, die Möglichkeit der Lösung des inversen Problems durch Parameteranpassung in grundsätzlicherer Weise zu klären.

2.) Anpassung des Brechzahlprofils

Die resultierende Matrix repräsentiert das optische Verhalten der planparallelen Probe, und sie enthält drei voneinander unabhängige komplexe Größen, da die Determinante den Wert Eins besitzt. Auf der anderen Seite erhält man bei gegebenen komplexen Brechzahlen der Abschlußmedien A und B mit Hilfe der resultierenden Matrix die im Experiment zugänglichen drei reellen Größen $R_{\text{res}}(A \rightarrow B)$, $T_{\text{res}}(A \leftrightarrow B)$ und $R_{\text{res}}(B \rightarrow A)$. Wie oben schon erwähnt, kann man unter gewissen Voraussetzungen daraus die Koeffizienten der res. Matrix gewinnen.

Die Zurückführung der res. Matrix ihrerseits auf das konkrete Brechzahlprofil in der Probe, d.h. die Lösung des inversen Problems ohne Bezug auf ein gegebenes Dispersionsmodell, ist insofern problematisch, als die Brechzahlen bei verschiedenen Wellenlängen dann keinen „inneren“, d.h. mikrophysikalischen Zusammenhang besitzen. Die Ausnutzung der spektralen Abhängigkeiten der Meßgrößen in sich und untereinander zur Profilbestimmung ist damit sinnlos.

Damit reduziert sich das inverse Problem auf die Gewinnung des Brechzahlprofils aus den Meßgrößen bei nur einer einzigen Wellenlänge. Da es sich um komplexe Brechzahlen handelt, ist zu bemerken, daß bei der modellfreien Inversion auch Realteil und Imaginärteil nicht mehr in einem „inneren“, weil durch einen mikrophysikalischen Dispersionsresponse gegebenen Zusammenhang stehen.

Bei der Anpassung eines Brechzahlprofils, bestehend aus j (max) Schichten, also gegeben durch j (max) komplexe Brechzahlen, sind im Sinne der Lösung dieses Problems als Optimierungsaufgabe nunmehr $2 * j$ (max) voneinander unabhängige „Stützstellen“ zu bestimmen. Bei nur drei verfügbaren Meßgrößen, nämlich $R_{\text{res}}(A \rightarrow B)$, $T_{\text{res}}(A \leftrightarrow B)$ und $R_{\text{res}}(B \rightarrow A)$, ist bei einer größeren Schichtzahl das Optimierungssystem hochgradig unterbestimmt und deshalb keine eindeutige Lösung zu erwarten.

Um ein konkretes Beispiel (siehe Anhang A4) vorzuführen, wurden die drei „Meßgrößen“ bei gegebenen Abschlußmedien (hier beiderseits Vakuum) zunächst mit Hilfe einer res. Matrix berechnet, die ihrerseits für drei Schichten eines Halbleiters mit je unterschiedlicher Dotierung gilt. Für die Darstellung der inhomogenen Probe in der Inversion wurde ebenfalls ein Dreischichtsystem angesetzt, also wurden 6 Parameter zur Anpassung vorgesehen. Tatsächlich konvergiert die Parameteranpassung relativ schnell mit dem vorgegebenen Toleranzwert, so daß die „Meßwerte“ entsprechend genau reproduziert, d.h. im vorliegenden Fall eine ähnliche Inhomogenitätsstruktur, das ist im vorliegenden Fall eine monoton variierende Stufung, erreicht. Die ermittelten komplexen Brechzahlwerte stimmen jedoch in erheblichem Maße nicht mit den „wahren“ Werten, d.h. mit den Werten zur Berechnung der „Meßwerte“ überein. Damit ist erwiesen, daß bei praktisch realisierbarer Meßgenauigkeit bezüglich der Inversion Mehrdeutigkeit

herrscht, wenn auf die Ausnutzung des spektralen Zusammenhangs, wie er durch den Dispersionsmechanismus in gravierender Weise gegeben ist, verzichtet wird.

Die Absorptionszahlen $k(i)$ erscheinen, und das ist hier bei der nur für eine Wellenlänge stattfindenden Anpassung wichtig festzuhalten, zwar richtig als positive Größen, sie sind aber derart mit der reellen Brechzahl $n(i)$ kombiniert, daß als Dispersionsmechanismus die freien Ladungsträger in einem Halbleiter ausscheiden. Bei Halbleitern mit sich ändernder Konzentration freier Ladungsträger variieren n und k bei den hier verwendeten mikrophysikalischen Parametern und der gegebenen Wellenlänge gegenläufig, d.h. die Brechzahl n nimmt (mit wachsender Trägerkonzentration) ab, während die Absorptionszahl k zunimmt. Bei den im Beispiel auftretenden angepaßten n - und k -Paaren ist es umgekehrt: Es kombiniert sich die höhere Brechzahl $n = \text{Re}\{\tilde{n}\}$ mit der höheren Absorptionszahl $k = -\text{Im}\{\tilde{n}\}$. Damit ist festzustellen, daß das Ergebnis der versuchten Inversion durch n - k -Anpassung bei fester Wellenlänge nicht im Einklang mit dem „inne-

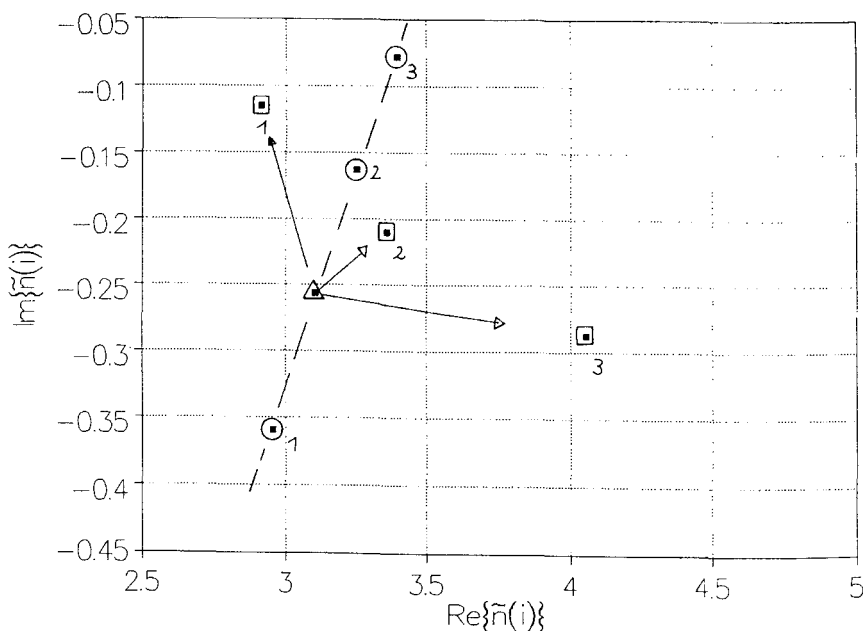


Abb. 3

Komplexe Ebene für die Brechzahlwerte bei der Anpassung eines Brechzahlprofils, bestehend aus drei homogenen Schichten der Nr. $i = 1, 2$ und 3 :

⊙ i = Vorgabewerte für die Berechnung der „Meßwerte“

◻ i = durch Anpassung gewonnene Werte.

---- = „Drude-Gerade“ als geometrischer Ort für die Brechzahlvariation bei Änderung der Konzentration freier Ladungsträger

△ = Startmodellwert für $\tilde{n}(1) = \tilde{n}(2) = \tilde{n}(3)$ bei der Anpassungsrechnung.

Zur Erläuterung siehe Text in Abschnitt III, 2.) und Anhang A4.

ren“, d.h. mikrophysikalischen Dispersionsmechanismus steht. Da die Inversionsprozedur keine Randbedingung enthält, die den Dispersionsmechanismus einbringt, öffnet sich die Inversion zur Mehrdeutigkeit. – Zur Erläuterung findet sich in der Abb. 3 eine komplexe \tilde{n} -Ebene, in die die im Beispiel auftretenden Brechzahlen für die dreischichtige Probe eingetragen sind. Man erkennt daraus auf einen Blick, was sich im Rahmen der versuchten Inversion ergeben hat.

Es bleibt die Frage offen, ob man durch Einbau wenigstens eines „rudimentären Regelwerkes“ in den Optimierungsalgorithmus die Inversion eindeutig gestalten und/oder die Zahl der Schichten zur Inhomogenitätsdarstellung erhöhen kann. So käme z.B. hier in Frage die Vorschrift, daß n und k stets gegenläufig variiert werden müssen.

Ein übergeordneter, weil modellfreier Zusammenhang der spektralen Variation von n und k könnte ferner dadurch in den Optimierungsalgorithmus eingebaut werden, daß als Bedingung die Erfüllung der Kramers-Kronig-Relation zwischen n und k gewährleistet ist. Damit würde zugleich auch sichergestellt, daß bei der Inversion für n und k je getrennt die spektrale Variation stetig verläuft. Auf diese Weise lassen sich die Meßwerttripel, die bei unterschiedlichen Wellenlängen aufgenommen wurden, doch wieder gemeinschaftlich auswerten.

Wie die allgemeinen Überlegungen nahelegen und das Beispiel zeigt, erscheint jedenfalls die eindeutige Inversion eines Dreiersatzes der Reflexions- und Transmissionswerte bei einer isolierten Wellenlänge mit dem Ergebnis eines konkreten und feinstrukturierten Brechzahlprofils nicht möglich.

3.) Anpassung mikrophysikalischer Profilparameter:

Anpassung des Konzentrationsprofils freier Ladungsträger in Silizium als Beispiel

Als Test, inwieweit die numerische Anpassung eines mikrophysikalischen Parameters geeignet ist, aus drei Meßspektren rückwärts das reale Inhomogenitätsprofil zu bestimmen, wurde in einem Beispiel Silizium als Halbleiter gewählt, in dem als Dispersionsmodell die Drude-Theorie für den dielektrischen Einfluß freier Ladungsträger angewandt werden kann. In der Praxis ist ein solcher Fall recht gut realisierbar. Allein die qualitative Einschätzung von experimentellen Spektren an einer Probe aus reinem Silizium, die z.B. durch Diffusion oder Ionenimplantation entsprechend inhomogen dotiert wurde, führt den erfahrenen Halbleiterphysiker genau zu einem derartigen Modellansatz.

Die Abb. 4 zeigt in Kurve „A“ das vorgegebene Konzentrationsprofil und Abb. 5 die sich dafür ergebenden Spektren. Bei der Berechnung dieser Spektren wurden sowohl eine wellenlängenunabhängige Stoßzeit als auch eine konzentrationsunabhängige effektive Masse angesetzt²⁾. Eine derartige Vereinfachung innerhalb des Dispersionsmodells ist im Rahmen der hier zur führenden Diskussion der Lösung des inversen Problems durch Parameteranpassung keine Einschränkung der Allgemeinheit, denn innerhalb der

²⁾ Die verwendeten Werte für die mikrophysikalischen Materialkonstanten $\epsilon_{\text{rel, Wirt.}}$, τ und m^*/m_0 innerhalb der Drude-Theorie entsprechen den im Anhang A3 angegebenen.

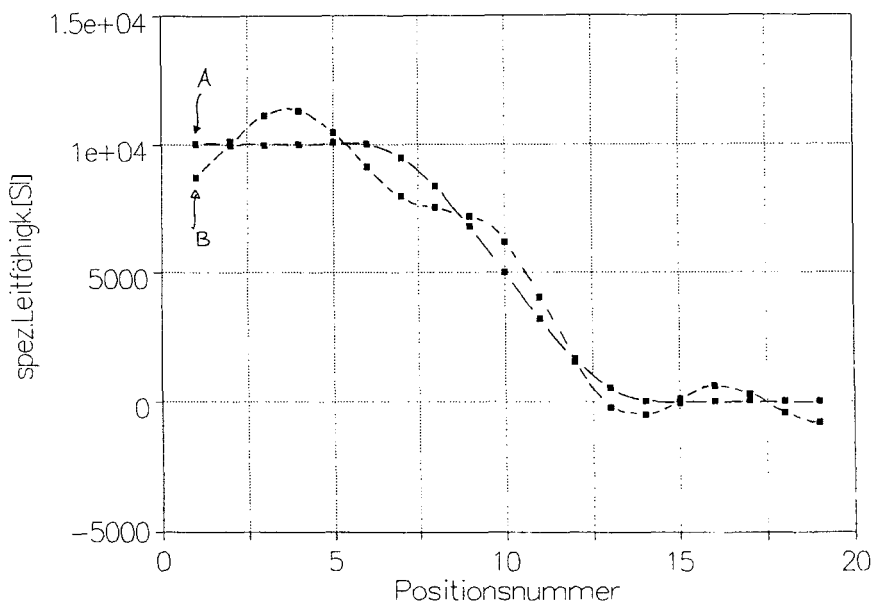


Abb. 4

Sigmoides Profil der spez. Gleichstromleitfähigkeit einer Probe, aus deren optischen Spektren durch Inversion das Inhomogenitätsprofil zurückgewonnen wurde:

Kurve „A“: Erwartetes Profil, weil Grundlage der optischen Spektren

Kurve „B“: Resultat der Anpassungsrechnung.

Das „Startmodell“ für die Anpassung war das Profil nach Kurve „A“ in Abb. 6.

Zur Erläuterung siehe Text in Abschnitt III, 3.).

Anpassungsroutine wird später das gleiche Dispersionsmodell verwendet. In der Praxis der Anpassung experimenteller Spektren im konkreten Fall müssen natürlich alle verfügbaren Kenntnisse über das optische Verhalten des vorliegenden Materials in die Modellrechnung einbezogen werden, wobei insbesondere auch die Interdependenzen der mikrophysikalischen Parameter berücksichtigt werden müssen, also z.B. die Konzentrationsabhängigkeiten der effektiven Masse und der Stoßzeit. – Unbekannte bzw. unerkannte Einflüsse dagegen werden eine korrekte Inversion vereiteln oder zu falschen Profilparametern führen.

Abb. 4 zeigt in Kurve „B“ das Profil freier Ladungsträger im Beispielfall, wie es sich aus der Anpassungsrechnung ohne weiteres Zutun ergeben hat. Als „Startmodell“ für das Stützstellenprofil war ein Konzentrationsverlauf nach Kurve A in Abb. 6 verwendet worden. Zu dem Ergebnis der Anpassungsrechnung nach nur 10 Iterationen ist festzustellen, daß die Inversion als gelungen zu bezeichnen ist. Die Fehlerquadratsumme hat sich dabei vom Startwert $\chi^2_{\text{Start}} = 0,865$ auf den Endwert $\chi^2_{10 \text{ Iter}} = 0,42\text{E-}4$, also etwa um den Faktor $2\text{E}4$ reduziert.

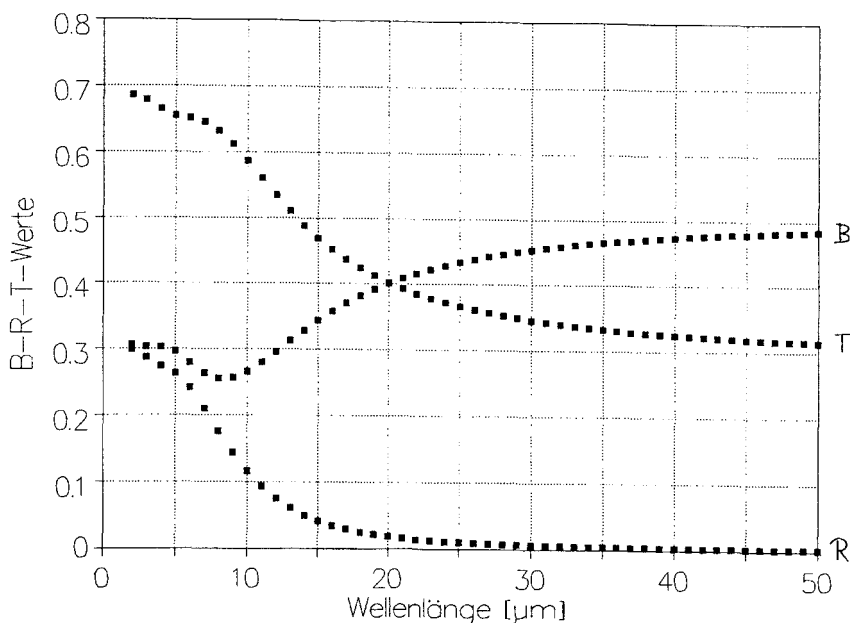


Abb. 5

Berechnete resultierende Spektralwerte der Reflexionen

$R_{\text{res}} (A \rightarrow B)$ [Kurve „R“] und

$R_{\text{res}} (B \rightarrow A)$ [Kurve „B“] sowie der Transmission

$T_{\text{res}} (A \leftrightarrow B)$ [Kurve „T“]

für die Probe mit dem sigmoiden Leitfähigkeitsprofil nach Kurve „A“ in Abb. 4.

Zur Erläuterung siehe Text in Abschnitt II, 3.).

Das angepaßte Profil zeigt zwar gegenüber dem erwarteten sigmoiden Profil der Abb. 4 Kurve „A“, das den „Meßspektren“ zugrunde liegt, noch eine überlagerte periodische „Oszillation“ mit der Periode der 6-fachen Schichtdicke für die optische Rechnung. Dies ist aber lediglich eine Folge der Verwendung von kubischen Splines zur Interpolation zwischen den angepaßten Profilpunkten als den primären Anpassungsparametern bzw. Stützstellen*). Bei einem kubischen Spline werden nämlich zwischen zwei Stützstellen stets zwei Bézierpunkte berechnet. Im Sinne der Fourierdarstellung des Profils entsteht auf diese Weise eine überlagerte Oszillation mit der Ortswellenlänge von zwei Stützstellenabständen gleich dem 6-fachen des Abstandes zweier Bézierpunkte, der im vorliegenden Fall gleich der optischen Einzelschichtdicke, d.h. gleich der optischen Schrittweite zur approximativen Einteilung des Pro-

*) Im vorliegenden Fall liegen die primären Stützstellen bei den Positionen $[1 + * p]$ mit $p = 1$ bis 6.

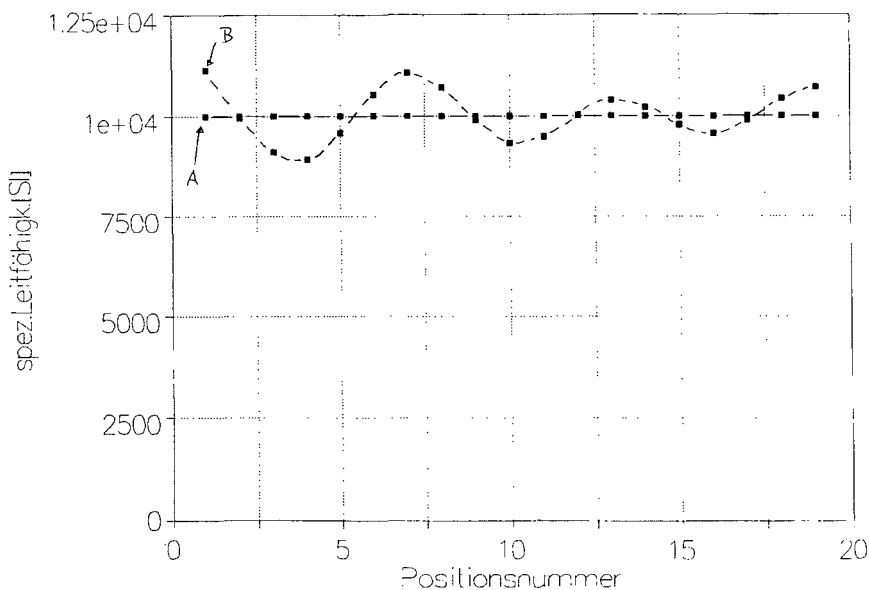


Abb. 6

Konstantes Profil der spez. Gleichstromleitfähigkeit einer Probe, aus deren optischen Spektren durch Inversion das Inhomogenitätsprofil zurückgewonnen wurde:

Kurve „A“: Erwartetes Profil, weil Grundlage der optischen Spektren

Kurve „B“: Resultat der Anpassungsrechnung.

Das „Startmodell“ für die Anpassung war das Profil nach Kurve „A“ in Abb. 4.

Zur Erläuterung siehe Text in Abschnitt III, 3.).

films in eine Stufenfolge homogener Schichten ist. Zur Vermeidung einer solchen Überlagerung sollte man, die Existenz einer hinreichenden Rechenleistung vorausgesetzt, stets die Interpolation vermeiden, d.h. die Zahl der anzupassenden Stützstellen (= Zahl der Anpassungsparameter) gleich groß der Zahl der Schichten (= Matrizenzahl) zur Berechnung der Spektren wählen.

Es sei hier nochmals darauf hingewiesen, daß bei dieser Anpassungsrechnung die Ausgangssituation für das anzupassende Profil, also die Parametervorgabe, ein konstantes Profil (vergl. Kurve „A“ in Abb. 6), d.h. eine ortsunabhängige Konzentration freier Ladungsträger war. Die Optimierung startet also mit einer Fehlerquadratsumme, die durch die Differenz der jeweils drei Spektren für das sigmoide Profil „A“ der Abb. 4, das den „Meßspektren“ (s. Abb. 5) zugrundeliegt, und den „Startspektren“ (s. Abb. 7) auf der Grundlage des konstanten Ausgangsprofilverlaufs „A“ der Abb. 6 entspricht.

Um ein zweites Beispiel der korrekten Inversion zu erhalten und um zugleich eine „Gegenprobe“ zum ersten Fall durchzuführen, wurde die umgekehrte Anpassung durchgeführt: Die „Meßspektren“ waren die mit Hilfe der homogenen Konzentration (Kurve „A“ der Abb. 6) berechneten Spektren, die in Abb. 7 gezeigt werden. Das Start- bzw.

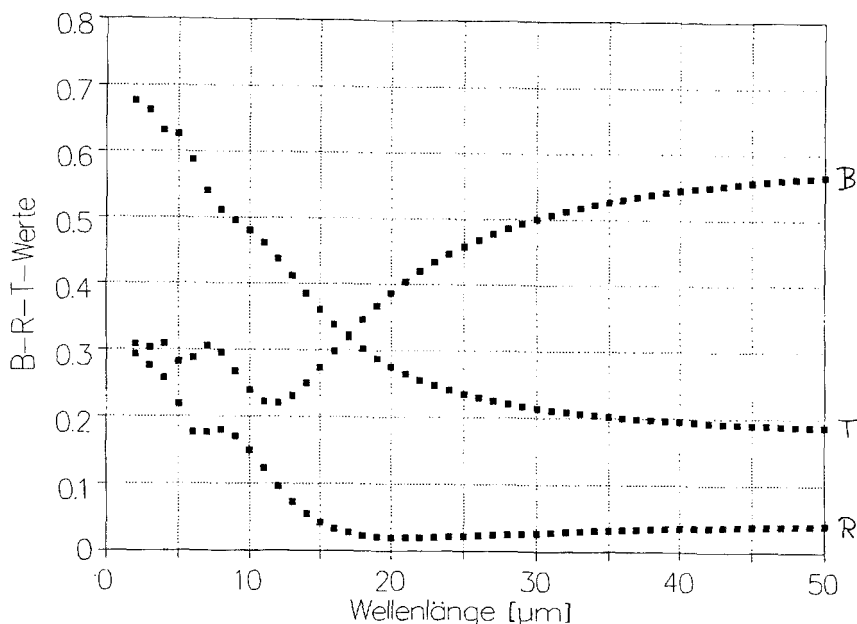


Abb. 7

Berechnete resultierende Spektralwerte der Reflexionen

$R_{\text{res}}(A \rightarrow B)$ [Kurve „R“] und

$R_{\text{res}}(B \rightarrow A)$ [Kurve „B“] sowie der Transmission

$T_{\text{res}}(A - B)$ [Kurve „T“]

für die Probe mit dem unmodulierten Leitfähigkeitsprofil nach Kurve „A“ in Abb. 6.

Zur Erläuterung siehe Text in Abschnitt II. 3.).

Ausgangsprofil für die Anpassung war andererseits nun die sigmoide Profilfunktion nach Kurve „A“ Abb. 4 mit den zugehörigen „Startspektren“ (s. Abb. 5).

Durch Vergleich der jeweils korrespondierenden Spektren von Abb. 5 und Abb. 7 untereinander läßt sich übrigens einschätzen, welche spektralen Veränderungen sich ergeben, wenn in der Probe das Profil der freien Ladungsträger zwischen dem sigmoiden und dem konstanten Profil gewechselt wird. Zugleich kann man damit beurteilen, welche Veränderungen in den Spektren bei der Anpassungsprozedur numerisch-rechnerisch nachvollzogen werden müssen.

Abb. 6 zeigt in Kurve „B“ das Ergebnis der Anpassung an das erwartete konstante Profil (Kurve „A“ in Abb. 6): Zieht man auch hier die überlagerte Oszillation mit der Periode der sechsfachen optischen Schrittweite ab, so ergibt sich exakt die erwartete homogene Dotierung, d.h. die Inversion ist auch in der „umgekehrten Richtung“ gelungen. Wieder wurden 10 Iterationen durchgeführt, und für die Werte der Fehlerquadratsumme gelten fast die gleichen Zahlen wie oben für die erste Anpassungsrechnung angegeben.

Bekanntlich hängt die Möglichkeit der Lösung einer Optimierungsaufgabe im erwarteten Sinne u.U. von einer „geschickten“ Vorgabe der Startparameter, also hier von einer „günstigen“ Vorgabe des Ausgangsprofils ab. Ansonsten kann sich die Minimumsuche der Optimierung in einem Nebenminimum mit noch zu hoher Fehlerquadratsumme „festfahren“, wenn nicht die Optimierungsstrategie für einen solchen Fall entsprechende „Ausweichmanöver“ vorsieht. Im vorliegenden Fall waren die beiden Ausgangsprofile in diesem Sinne offenbar jeweils „zweckmäßig“ gewählt worden. Außerdem enthält die numerische Prozedur der Optimierung eine „Selbstbefreiungsroutine“, die offenbar gut funktioniert. Ob jedoch überhaupt Nebenminima existieren, in welchem Maße sich diese sekundären Minima von dem absoluten Minimum unterscheiden und welche kritische Fehlerquadratsumme zum Abbruch der Minimumsuche zweckmäßigerweise vorgegeben werden sollte, ist nicht allgemein zu beurteilen. – Wenn bei experimentellen Vorgabespektren die Meßgenauigkeit nicht hoch genug ist, wird natürlich eine Bestimmung des Inhomogenitätsprofils durch Anpassung in jedem Fall ungenau bleiben, selbst wenn die Optimierungsprozedur eine Unterschreitung der vorgegebenen kritischen Fehlerquadratsumme feststellt und dann die Rechnung planmäßig abgebrochen wird.

IV Zusammenfassung

Das in der Physik in vielfältiger Weise auftretende „inverse Problem“, das ist die Frage der eindeutigen Gewinnung differentieller Größen aus integral (meist im Außenraum) aufgenommenen Meßwerten, stellt sich im Bereich der spektraloptischen Materialanalyse in besonderer Weise: Ist es möglich, aus den im Außenraum vermessenen Spektren der Reflexion und Transmission elektromagnetischer Strahlung auf die innere Struktur der in ihrer komplexen Brechzahl inhomogenen Probe in eindeutiger Weise zurückzuschließen?

Diese Probestellung wird in der vorliegenden Arbeit in spezieller Weise diskutiert und zunächst in bezug auf die folgenden Gesichtspunkte analysiert: Ist im Rahmen des Matrizenkalküls zur mathematischen Behandlung des optisch inhomogenen Systems

- a) eine „Paarkompensation“ innerhalb des Matrizenproduktes und
- b) eine „Paardarstellung“ der resultierenden bzw. einer widerstandsunsymmetrischen Matrix möglich.

Beide Möglichkeiten würden bereits die Eineindeutigkeit der Inversion ausschließen.

Da die Ortsfunktion der phänomenologischen komplexen Brechzahl $\tilde{n} = (n - i \cdot k)$ das optische Verhalten bestimmt, wird sodann die Frage diskutiert, ob ein Brechzahlprofil als $f(x)$ durch „Parameteranpassung“ von $n(x)$ und $k(x)$ im Sinne einer Optimierungsaufgabe aus den optischen Spektren in eindeutiger Weise gewonnen werden kann. Dabei ist dann jedoch „nach Voraussetzung“ zwischen Brechzahl n und Absorptionzahl k einerseits und benachbarten Spektralwerten andererseits kein mikrophysikalischer Dispersionszusammenhang existent, wenn man von der Notwendigkeit der Erfüllung der integralen Transformationsgleichungen in der Form der sog. Kramers-Kronig-Relation absieht.

Kann man einen mikrophysikalischen Dispersionszusammenhang jedoch voraussetzen, so sind die lokalen Stützstellen die ortsabhängigen Quantitäten der mikrophysikalischen Parameter des Dispersionsmodells, und der Zusammenhang zwischen n und k einerseits und der Gesamtheit der Spektralwerte andererseits liegt fest. Die Parameteranpassung ist dann ebenfalls eine Optimierungsaufgabe, bei der die Fehlerquadratsumme, gebildet aus der Differenz aller korrespondierenden Spektren, minimiert wird.

Die Überlegungen und Beispielrechnungen für einen Halbleiter mit inhomogener Konzentration freier Ladungsträger (Drude-Modell) zeigen, daß nur in letzterem Fall, dann aber mit großer Evidenz, eine Inversion durchgeführt werden kann, die im Sinne einer Optimierungsrechnung in eindeutiger Weise abläuft und zum erwarteten Resultat führt. Man kann daraus den Schluß ziehen, daß der zugrunde liegende mikrophysikalische Dispersionsmechanismus einerseits und die Heranziehung der drei hinreichend ausgedehnten optischen Spektren der Reflexion (in beiden Lichtausbreitungsrichtungen) und der Transmission andererseits die Eindeutigkeit der Inversion zur Folge haben.

Da die vorgestellten Ergebnisse jedoch keinen generellen Eindeutigkeitsbeweis für die Inversion optischer Spektren zur Gewinnung der Inhomogenitätsstrukturen der Probe darstellen können, mögen sie als hilfreiche „Bemerkungen“ zu dieser Thematik aufgefaßt werden.

Literatur³⁾

- [1] a) Eine Einführung und zahlreiche Literaturverweise bietet z.B.: Alfred K. Louis, „Inverse und schlecht gestellte Probleme“, Teubner-Verlag, Leipzig, 1989
- b) Laurence R. Lines (Ed.), Franklyn K. Levin (Series Ed.), Inversion of Geophysical Data, SEG, Tulsa/Oklahoma, 1988; No. 9, Geophysics reprint series, Society of Exploration Geophysicists
- c) Gottfried Anger, Rudolf Gorenflo, Horst Jochmann et al. (Herausgeber): Inverse Problems: Principles and Applications in Geophysics, Technology, and Medicine – Proc. Int. Conf. held in Potsdam August 30 – September 2, 1993, Akademie-Verlag, Berlin, 1993 [Reihe: Mathematical Research, vol. 74]
- {1}
- [2] Symposium „Das Inverse Problem“, Berlin 9.9.1994. Vergl. dazu die Besprechung von Dieter Hoffmann und Heinz Lübbig in der Frankfurter Allgemeinen Zeitung vom 21.9.1994. Die Beiträge sind zusammengefaßt in der Buchveröffentlichung: Heinz Lübbig (Editor), The Inverse Problem, Symposium ad memoriam Hermann von Helmholtz, Phys. Techn. Bundesanstalt (PTB) und Akademie-Verlag, Berlin, 1996, ISBN 3-0529330-2 {1}
- [3] H. Helmholtz, Über einige Gesetze der Vertheilung elektrischer Ströme in körperlichen Leitern mit Anwendung auf die thierisch-elektrischen Versuche, Annalen der Physik und Chemie, vol. 89 (1853), p. 211–233 und p. 353–377 {1}
- [4] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling and Brian P. Flannery, Numerical recipes, 2. Auflage, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1992 {I, III 1.}

³⁾ Bei der angegebenen Literatur handelt es sich um Quellen, in denen die angesprochene Thematik abgehandelt wird und/oder anhand der dort angeführten Zitate weiterverfolgt werden kann. – Die Angabe in { } am Ende des hiesigen Zitates verweist auf das Kapitel, in dem der Literaturverweis auftritt.

- [5] E. Wolf and T. Habashy, Invisible bodies and uniqueness of the inverse scattering problem, *J. Modern Optics* (formerly *Optica Acta*), vol. 40 (1993), p. 785–792 {I}
- [6] a) Avinash C. Kak and Malcolm Slaney, *Principles of computerized tomographic imaging*, IEEE Press, New York, 1988
- b) William R. Hendee, *Physical principles of computed tomography*, Little Brown and Co, Boston (USA), 1983
- c) Christopher Marshall and David J. Goodenough, *The physical basis of computed Tomography*, Green, St. Louis, Mo., 1982
- d) Gabor T. Herman, *Mathematical aspects of computerized tomography*, [Proceedings of a conference held in Oberwolfach/Germany February 10–16, 1980], Springer, Berlin, 1981
- e) Gabor T. Herman, *Mathematical methods in tomography*, [Proceedings of a conference held in Oberwolfach/Germany June 5–11, 1990], Springer, Berlin, 1991
- {I}
- [7] Zum Ursprung der Kramers-Kronig-Relation (KRR) siehe:
 - a) H.A. Kramers und W. Heisenberg, *Zeitschr. Phys.*, vol. 31 (1925), p. 681
 - b) R. de L. Kronig, On the Theory of Dispersion of x-Rays, *J. Opt. Soc. Amer.*, vol. 12 (1926), p. 547–557
 - c) H.A. Kramers, Estratto dagli Atti del Congresso internazionale dei Fisici Como Sett. 1927, vol. 2, p. 545; Nicolo Zonichelli, Bologna, 1927
 - d) R. de L. Kronig, Dispersionstheorie im Röntgengebiet, *Phys. Zeitschr.*, vol. 30 (1929), p. 521–522
 - e) H.A. Kramers, Die Dispersion und Absorption von Röntgenstrahlen, *Phys. Zeitschr.*, vol. 30 (1929), p. 522–523
- {I}
- [8] Zu Darstellungen der KKR insbesondere mit Bezug auf die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen bzw. die Optik der Festkörper siehe:
 - a) K.-D. Becker, *Ausbreitung elektromagnetischer Wellen*, Springer-Verlag, Berlin 1974
 - b) Frederick Wooten, *Optical Properties of Solids*, Academic Press, New York, 1972
 - c) R.K. Ahrenkiel, Modified Kramers-Kronig-Analysis of Optical Spectra, *J. Opt. Soc. Amer.*, vol. 61 (1971), p. 1651–1655 und vol. 62 (1972), p. 1009
- {I}
- [9] A. Sharma, D.V. Kumar, and A.K. Gathak, *Appl. Opt. APOPA*, vol. 21 (1982), p. 984–987 {I}
- [10] E. Hild and A. Grofcsik, *Infrared Physics*, vol. 18 (1978), p. 23–33 {I}
- [11] Richard Feldkeller, *Einführung in die Vierpoltheorie der elektrischen Nachrichtentechnik*, 6. Auflage, S. Hirzel Verlag, Stuttgart, 1953 {I, II 1.}
- [12] a) F. Abelès, Propagation des ondes électromagnétiques sinusoidales, *Ann. de Physique*, vol. 5 (1950), p. 596–640, 706–782
- b) G. Schulten, *Über die Fortpflanzung elektromagnetischer Wellen in dielektrischen Mischkörpern*, Dissertation Ruhr Universität, Bochum, 1970
- {I, II 1.}
- [13] a) F.R. Keßler, Optische Wirkung von Konzentrationsprofilen freier Ladungsträger in Halbleitern, *Abhandl. d. Braunschweigischen Wiss. Ges.*, vol. 36 (1984), p. 45–85; ISBN 3-88452-218-3
- b) F.R. Keßler, Optics with Gradients of free Carrier Concentration, in: *Festkörperprobleme/Advances in Solid State Physics*, P. Grosse (Herausgeb.), Vieweg-Verlag, Wiesbaden, 1986, vol. XXVI, p. 277–308
- {I, II 1.}
- [14] R. Nies, F.R. Keßler, U. Scheuermann, and H. Luka, Electrical and Structural Characterisation of Inhomogeneously Doped Semiconductors by Infrared Spectroscopy, *Int. J. of Infrared and Millimeter Waves*, vol. 11 (1990), p. 227–242; SPIE vol. 1240, 1989, p. 116–117 {I, II 1.}

- [15] B. Harbecke, Appl. Phys., vol. B39 (1986), p. 165 {II 1.}
- [16] M. Born and E. Wolf, Principles of Optics, Pergamon Press, Oxford, 1964 {II 1.}
- [17] a) J.R. Wait, Electromagnetic Waves in Stratified Media, Pergamon Press, Oxford, 1964
 b) M. Schlick, Dissertation Berlin, 1904
 c) V.F. Lawrence and H. Hora, Optik, vol. 55 (1980), p. 291–302
 d) W. Kofink und E. Menzer, Ann. d. Phys., 5. Folge, vol. 39 (1941), p. 388–402 {II 1.}
- [18] F.R. Keßler, Optische Transformationsmatrix inhomogener dünner Schichten, Abh. d. Braunschweigischen Wiss. Ges., vol. 38 (1986), p. 203–227, ISBN 3-88452-220-5 {II 2.}
- [19] a) R. Fletcher and M.J.D. Powell, A rapidly convergent descent method for minimization, Computer Journal, July 1963, p. 163–168
 b) R.P. Brent, Algorithms for Minimization without derivatives, Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall, 1973 (insbesondere Kapitel 7) {III 1.}

Anhang A1: Veränderung zweier Schichtparameter mit „Paarkompensation“ – ein Rechenbeispiel

Die resultierende Matrix MX ist das geordnete Produkt der Matrizen zu dem folgenden Modellprofil: In einem 10-Schichten-System eines Halbleiters mit Variation der Konzentration der freien Ladungsträger von Schicht zu Schicht werden die relevanten komplexen Brechzahlen nach dem Drude-Dispersionsmechanismus berechnet mit folgenden Werten:

a) allgemeine Parameter:

$$\begin{aligned}\tilde{\epsilon}_{\text{rel, Wirt}} &= 12,50 \\ \text{Stoßzeit } \tau &= 7,8\text{E-15 [sec]} \\ \text{Wellenlänge} &= 8 [\mu\text{m}] \\ m^*/m_0 &= 0,45\end{aligned}$$

b) für die Einzelschichten gilt: je gleiche Dicke $d = 1 [\mu\text{m}]$ mit folgenden Konzentrationen an freien Ladungsträgern

| Nr. | Konzentr. [in l/m^3] | Nr. | Konzentr. [in l/m^3] |
|-----|--------------------------------|-----|--------------------------------|
| 1 | 0,8E25 | 6 | 3,5E25 |
| 2 | 1,0E25 | 7 | 3,0E25 |
| 3 | 1,8E25 | 8 | 2,5E25 |
| 4 | 2,4E25 | 9 | 2,0E25 |
| 5 | 2,7E25 | 10 | 1,0E25 |

Die Konzentration in der Schicht Nr. 2 wird auf den Wert 1,2E25 erhöht, also um 20%. Gesucht ist die Matrix MB' für die Schicht Nr. 7, die dann in Kompensation der Veränderung in der Schicht Nr. 2 zur gleichen resultierenden Matrix MX führt.

Die Schichtmatrix MB' ist nach Gl. (13) eindeutig bestimmt.

Es ergibt sich folgendes Resultat:

An die Stelle der ursprünglichen Matrix MB für die Schicht Nr. 7 tritt die Matrix MB' mit der Variation, die sich aus dem Vergleich ergibt:

$$MB = \begin{vmatrix} (-0,7778; 0,1313) & (-25,25; 78,06) \\ (-8,252E-4; 5,540E-3) & (-0,7778; 0,1313) \end{vmatrix}$$

$$MB' = \begin{vmatrix} (-0,7946; 0,1306) & (-23,29; 74,42) \\ (-8,109E-4; 5,478E-3) & (-0,7871; 0,1079) \end{vmatrix}$$

In beiden Fällen gilt, daß die Determinanten notwendigerweise gleich Eins sind, wie die Prüfung bestätigt. Damit ist nicht nur für MB, sondern auch für MB' die Übertragungssymmetrie gegeben.

Für MB ist, entsprechend der Repräsentanz einer homogenen Schicht, auch die Widerstandssymmetrie gegeben. Der Wellenwiderstand $\tilde{Z}(B)$ hat den Wert:

$$\tilde{Z}(B) = (120,61; 9,972).$$

Für die Übertragungssymmetrie gilt die Brechzahl

$$\tilde{n}(B) = (3,1044; -,25666).$$

Für MB' ist keine Widerstandssymmetrie gegeben, da $mb'_{11} \neq mb'_{22}$ ist. Durch Auswertung erhält man die beiden Wellenwiderstände [nach Gl. (6)]

$$\tilde{Z}_1(B') = (119,23; 7,816); \tilde{Z}_2(B') = (117,39; 10,842).$$

Aus der Übertragungssymmetrie folgt, daß eine Auswertung der Koeffizienten der Matrix MB' zur Bestimmung der Brechzahl $\tilde{n}(B')$ möglich ist. Es ergibt sich der Wert:

$$\tilde{n}(B') = (3,1332, -,23963).$$

Als Folge der Widerstandsunsymmetrie ist festzustellen, daß die Kompensationsmatrix MB' nicht Repräsentant einer homogenen Schicht sein kann.

Anhang A2:

Bestimmung der Koeffizienten bei der „Paardarstellung“ der resultierenden Matrix MX

Zur „Paardarstellung“ einer resultierenden Matrix MX in der Form

$$MX = MB * MA \text{ mit } \text{DET}(MX) = 1$$

ergeben sich unter der Voraussetzung

$$\text{DET}(A) = \text{DET}(B) = 1$$

sowie

$$ma_{11} = ma_{22} \text{ und } mb_{11} = mb_{22},$$

d.h. MA und MB sind jeweils die Vierpolmatrizen einer homogenen Schicht, durch Auflösung der Produktgleichungen für die vier Koeffizienten von MX sukzessiv die folgenden Bestimmungsgleichungen für die Koeffizienten mb_{21} , ma_{11} und mb_{11} :

$$mb21 = \sqrt{(mx11)^2 + (ma21)^2 * [(mx11 + mx22)^2 / 4 - 1] - ma21 * (mx11 + mx22) / 2} \quad (I)$$

$$ma11 = (ma21 * mx22 + mb21) / mx21 \quad (II)$$

$$mb11 = (mb21 * mx11 + ma21) / mx21 \quad (III)$$

Zur Berechnung der Koeffizienten ist der Koeffizient $ma21$ als komplexe Zahl vorzugeben. Seine Wahl ist prinzipiell beliebig, sie kann aber, siehe Text, u.U. so getroffen werden, daß MA eine amagnetische Schicht, d.h. eine Schicht mit der Materialkonstanten $\tilde{\mu}_{rel}(A) = 1$, repräsentiert.

Anhang A3: Rechenbeispiel zur „amagnetischen Paardarstellung“

Zur „amagnetischen Paardarstellung“ gelangt eine res. Matrix, die zunächst berechnet wurde für ein Vierschichtsystem aus Silizium mit unterschiedlicher Konzentration freier Ladungsträger bzw. unterschiedlicher spez. Gleichstromleitfähigkeit σ_0 mit folgenden Parametern:

a) allgemeine Parameter:

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_{rel, \text{Wirt}} &= 12,25 \\ \text{Stoßzeit } \tau &= 7,8E-15 [\text{sec}] \\ \text{Wellenlänge} &= 10 [\mu\text{m}] \\ m^*/m_0 &= 0,45 \end{aligned}$$

b) für die Einzelschichten gilt:

| Nr. | Dicke [in μm] | Konzentr. [in l/m^3] | σ_0 [in $l/\Omega * m$] |
|-----|---------------------------|-------------------------|---------------------------------|
| 1 | 1 | 4,10E24 | 2000 |
| 2 | 1,5 | 14,35E24 | 7000 |
| 3 | 2,0 | 16,40E24 | 8000 |
| 4 | 0,8 | 10,25E24 | 5000 |

Die res. Matrix lautet damit für den Lichteinfall von 4 nach 1:

$$MX = \begin{vmatrix} (-0,163; -0,590) & (-8,41; 126,3) \\ (-1,18E-3; 1,08E-2) & (-0,223; 0,662) \end{vmatrix}$$

Gesucht ist die Darstellung $MX = MB * MA$ für homogene Medien bei der Matrix MB und bei MA sowie mit $\text{Im}\{\tilde{\mu}_{rel}(A)\} = 0$. – Die Dicke der Schicht „A“ wurde zunächst vorgegeben zu $d(A) = 1,8 [\mu\text{m}]$, sie kann später in eine effektive Schichtdicke umgewandelt werden, wenn das reelle $\mu_{rel}(A) = 1$ gesetzt wird.

Für die Suche nach $\text{Im}\{\tilde{\mu}(A)\} = 0$ wurden im ersten Schritt $\text{Re}\{\tilde{n}(A)\}$ und $\text{Im}\{\tilde{n}(A)\}$ statistisch unabhängig voneinander abgerastert. Das Resultat in der zweidimensionalen Darstellung $\text{Im}\{\tilde{\mu}_{rel}(A)\} * d(A) = f[\text{Re}\{\tilde{n}(A)\}]$ zeigt Abb. 1. Da

$\text{Im}\{\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A)\} * d(A)$ mehrfach das Vorzeichen wechselt, sind auch mehrere Nulldurchgänge von $\text{Im}\{\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A)\}$ vorhanden.

Danach wurde sowohl $\text{Im}\{\tilde{n}(A)\}$ bei festem $\text{Re}\{\tilde{n}(A)\}$ als auch $\text{Re}\{\tilde{n}(A)\}$ bei festem $\text{Im}\{\tilde{n}(A)\}$ systematisch variiert. Die Abb. 2a) bzw. 2b) zeigen die entsprechende Variation von $\text{Im}\{\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A)\} * d(A)$ in der Nähe einer herausgegriffenen Nullstelle.

Unter Verwendung des Wertes der Nullstelle aus Abb. 2a ergeben sich folgende Materialparameter für die Paardarstellung der res. Matrix MX:

$$\begin{aligned} \text{Schicht „A“: } \quad & \tilde{Z}(A) = (107,072; 0,7722) [\text{Ohm}] \\ \text{mit: } \quad & d(A) = 1,8 [\mu\text{m}] \text{ wie vorgegeben} \\ & \tilde{n}(A) = (3,828; -0,02760) \\ & \tilde{\mu}_{\text{rel}}(A) = (1,0873; 2,069\text{E-}6) \approx \text{rein reell} \end{aligned}$$

oder äquivalent dazu:

$$\begin{aligned} d_{\text{eff}}(A) &= 1,957 [\mu\text{m}] \\ \tilde{n}(A)_{\text{eff}} &= (3,521; -2,539\text{E-}2) \\ \tilde{\mu}_{\text{rel}}(A) &= 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Schicht „B“: } \quad & \tilde{Z}(B) = (102,99; 7,970) \\ & \tilde{n}(B) * d(B) = (0,3514; -0,9026) \\ & \tilde{\mu}_{\text{rel}}(B) * d(B) = (0,1151; -0,2392), \end{aligned}$$

d.h. bei einer angenommenen Schichtdicke von z.B. $d(B) = 0,1 [\mu\text{m}]$ ergeben sich für die homogene Schicht „B“ die folgenden materialspezifischen Werte:

$$\begin{aligned} \tilde{n}(B) &= (3,514; -9,026) \\ \tilde{\mu}_{\text{rel}}(B) &= (1,151; -1,392) \end{aligned}$$

Bei dieser „Paardarstellung“ der resultierenden Matrix MX ist die homogene Schicht „A“ durch Verwendung der effektiven Größen $d_{\text{eff}}(A)$ und $\tilde{n}_{\text{eff}}(A)$ wie gewünscht amagnetisch, d.h. es ist $\tilde{\mu}_{\text{rel}}(A) = 1$, die homogene Schicht „B“ ist jedoch ferromagnetisch und mit magnetischer Dämpfung versehen.

Beide Schichten sind aus homogener Materie gebildet.

Anhang A4: Anpassung eines phänomenologischen Brechzahlprofils – eine Beispielrechnung

Die Beispielrechnung geht von einem Dreischichtsystem aus. Jede Schicht hat die gleiche Dicke. Als Begrenzungsmedium wurde beiderseits Vakuum angenommen.

Die resultierenden „Meßwerte“ wurden nach dem EH-Matrizenverfahren berechnet, indem für jede Schicht die komplexe Brechzahl nach dem Drude-Modell für verschiedene Konzentrationen freier Ladungsträger eingesetzt wurde. Folgende Werte fanden Verwendung:

a) allgemeine mikrophysikalische Parameter:

$$\begin{aligned}\tilde{\epsilon}_{\text{rel, Wirt}} &= 12,50 \\ \text{Stoßzeit } \tau &= 7,8\text{E-15 [sec]} \\ \text{Wellenlänge} &= 8 [\mu\text{m}] \\ m^*/m_0 &= 0,45\end{aligned}$$

b) für die Einzelschichten gilt:

| Nr. | Dicke [in mm] | Konzentr. [in l/m ³] | Brechzahl | Brechzahl aus Anpassung |
|-----|---------------|----------------------------------|------------------|----------------------------|
| 1 | 1 | 4,0E25 | (2,954; -0,3597) | (2,913; -0,1151) |
| 2 | 1 | 2,0E25 | (3,252; -0,1633) | (3,360; -0,2104) |
| 3 | 1 | 1,0E25 | (3,396; -0,0782) | (4,055; -0,2875) |

Die damit berechneten und zur Anpassungsrechnung vorgegebenen „Meßgrößen“ hatten die Werte:

| | |
|--|----------------|
| | aus Anpassung: |
| $R_{\text{res}}(3 \rightarrow 1) = 0,4588$ | 0,4400 |
| $T_{\text{res}}(3 \leftrightarrow 1) = 0,1716$ | 0,1731 |
| $R_{\text{res}}(3 \leftarrow 1) = 0,3556$ | 0,3616 |

Als „Startmodell“ für die Anpassungsrechnung wurde in allen drei Schichten die gleiche Brechzahl $\tilde{n} = (3,104; -0,2566)$ entsprechend einer Konzentration $N = 3\text{E}25 [\text{l/m}^3]$ angenommen. Beim Start betrug damit die Fehlerquadratsumme $\chi^2_{\text{Start}} = 0,0172$.

Durch die Anpassung wurde bereits nach zwei Iterationen die Fehlerquadratsumme auf den Wert $\chi^2_{2 \text{ Iter.}} = 3,91\text{E-4}$, also um den Faktor 44 reduziert. Eine derartig niedrige Fehlerquadratsumme dürfte in der Praxis bereits aufgrund der realen Meßgenauigkeit der resultierenden Reflexions- und Transmissionswerte weitere Iterationen unsinnig machen.

Die sich aus der Anpassung ergebenden Brechzahlwerte der drei Schichten und die dafür gültigen „Meßwerte“ sind in den obigen Tabellen ebenfalls angegeben. Zum Ergebnis der Anpassung ist festzustellen: Die Stufenstruktur des gesuchten Brechzahlprofils wird durch die Anpassung richtig gefunden, wobei die Realteile der Brechzahlwerte der Größe nach akzeptierbar sind. Die Imaginärteile stimmen zwar ebenfalls der Größenordnung nach mit der Erwartung überein, sie variieren jedoch „gleichsinnig“ mit dem Realteil, was nicht dem gegebenen Dispersionsmodell entspricht.

Zur weiteren Diskussion des Ergebnisses siehe Text und zur graphischen Darstellung der Brechzahlwerte siehe Abb. 3.